

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA

TESIS DOCTORAL

Convección Natural en Cavidades Tridimensionales

Autora:

Odalys Sánchez Casals

Directores:

Isabel Mercader Calvo

Oriol Batista Boleda

Tesis presentada para optar por el Grado de Doctor en Ciencias

Departamento de Física Aplicada

29 de septiembre de 2015



UNIVERSITAT POLITÈCNICA
DE CATALUNYA
BARCELONATECH

“Nothing happens until something moves.”

Albert Einstein

Resumen

Convección Natural en Cavidades Tridimensionales

por Odalys SÁNCHEZ CASALS

La modelización de procesos de transporte convectivo por transferencia de calor y masa en un fluido newtoniano incompresible en dominios cilíndricos es un tema de investigación relevante para aplicaciones en la investigación teórica y en la industria. Sin embargo, los trabajos de investigación en modelos tridimensionales usando geometrías cilíndricas calentados lateralmente han sido más bien escasos. Aunque las aproximaciones bidimensionales con calentamiento lateral dan resultados significativos, las geometrías tridimensionales en dominios acotados son más realistas debido a que los campos de velocidad y temperatura son totalmente tridimensionales y no se puede despreciar el efecto que tienen las paredes en los problemas de transporte. Por ejemplo en simulaciones en cajas bidimensionales se observa que pueden existir estados estacionarios con más de un rollo convectivo para valores del parámetro de forma mayores que 2, sin embargo esto no se observa en los estudios en cajas 3D o cilindros para iguales parámetros. También hay discrepancias en cuanto a la naturaleza de la inestabilidad primaria y los valores críticos obtenidos para iguales parámetros.

En este trabajo de tesis simulamos tres problemas en los que el transporte convectivo se produce por diferencias de temperatura en las tapas del cilindro o por diferencias de concentración dentro del fluido, como ocurre en los experimentos de difusión en mezclas de metales líquidos o semiconductores.

En los dos primeros problemas se simula un cilindro horizontal con una diferencia de temperatura entre sus tapas, pero en el segundo problema se incluye la rotación del cilindro alrededor de su eje. Se investiga el comportamiento del fluido en función de distintas intensidades de calentamiento (número de Rayleigh), materiales (número de Prandtl) y tamaño del contenedor (parámetro de forma). Gran parte del trabajo estará dedicado a analizar las soluciones básicas y su estabilidad.

En el segundo problema se analiza con detalle el efecto que tiene la rotación del cilindro sobre el movimiento convectivo en función de la velocidad angular, cuyos valores han sido mantenidos bajos para poder observar la transición del tipo de flujo inicialmente dominado por la convección al fluido rotando como un sólido rígido junto con la pared del cilindro.

Para los dos problemas con calentamiento lateral caracterizaremos las soluciones del estado básico y determinaremos su diagrama de estabilidad. Describiremos algunas soluciones secundarias.

El tercer problema estará centrado en analizar la influencia que tiene la contaminación convectiva en las medidas de los coeficientes de difusión con el método del capilar largo en baja gravedad. Se compararán estos resultados numéricos para el capilar largo con los resultados obtenidos con la

técnica experimental *shear cells* simulada con el método de volúmenes finitos y con los resultados 2D de la literatura. Se valorará la influencia de los bajos niveles de gravedad, así como el efecto de la inclinación y la rotación del capilar, las oscilaciones del campo gravitatorio y la influencia de señales acelerométricas reales conocidas como *g-jitter* en las medidas de los coeficientes de difusión de una mezcla.

Empleamos las ecuaciones de Navier Stokes, en la aproximación de Boussinesq, para un fluido incompresible y viscoso acoplada a una ecuación para la temperatura o la concentración en coordenadas cilíndricas. Las ecuaciones se escribirán en el sistema de referencia de laboratorio.

Estas ecuaciones serán discretizadas espacialmente mediante un método pseudoespectral de Chebyshev-colocación para la dependencia radial y axial y el método Galerkin-Fourier para la variable azimutal y resueltas con un algoritmo de segundo orden de paso de tiempo fraccionario semi-implícito.

Agradecimientos

Agradezco en primer lugar a mis directores de tesis Isabel Mercader y Oriol Batista, que también asesoraron mi trabajo final de Máster, por su apoyo y guía brindados durante estos años, sin los cuales no hubiera sido posible la realización de este trabajo.

Agradezco a la agencia AGAUR de la Generalitat por la gestión de la beca recibida en el marco de la convocatoria FI-DGR 2012 (resolución ECO/2060/2011, del 1ro. de agosto), cofinanciada en un 50 % por los Fondos Sociales Europeos.

Agradezco al profesor Xavier Ruiz, Mónica Pujalte, Josefinà Gavalda y Nuria Saez del Departament de Química Física i Inorgànica, Universitat Rovira i Virgili, URV, Tarragona, por toda la colaboración brindada para la realización de una parte de este trabajo de tesis.

Agradezco a todo el PAS del Departamento de Física Aplicada de la Universidad Politècnica de Catalunya por el apoyo brindado tanto técnico como administrativo.

Agradezco a Arantxa Alonso por su inestimable ayuda en muchas situaciones en las que la necesité.

Agradezco a Marta Net y a Juan Sánchez por su supervisión y orientación académica durante mis estudios de Máster en este programa.

Agradezco a todos los compañeros de la asignatura Fonaments de Física la ayuda que me prestaron en mis tareas docentes.

Agradezco a todos los profesores y alumnos de doctorado del Departamento de Física Aplicada, y que no nombro aquí por temor a que se olvide algún nombre, y que de una u otra forma me han brindado su apoyo y colaboración durante estos años.

También agradezco al personal del Centro de Transferencia de Tecnología por las dudas aclaradas y la gestión de los documentos relativos con la beca.

Agradezco a mi familia y especialmente a mi hijo por la paciencia y apoyo que me han dado durante estos años . . .

Índice

Agradecimientos	VI
Contenido	VII
Nomenclatura	X
1. Introducción	1
1.1. Motivación.	1
1.2. Estructura de la Tesis	5
2. Ecuaciones y Métodos Numéricos	7
2.1. Ecuaciones del movimiento del fluido	7
2.1.1. Ecuaciones de Navier Stokes y transporte de energía	7
2.1.2. Condiciones de contorno	9
2.1.3. Simetrías	10
2.1.3.1. Cilindro fijo ($\Omega = 0$)	10
2.1.3.2. Cilindro con rotación axial ($\Omega \neq 0$)	11
2.1.4. Ecuaciones de Navier Stokes y transporte de masa	11
2.1.5. Condiciones de contorno e iniciales	12
2.2. Discretización Numérica. Algoritmo de predicción corrección	13
2.2.1. Esquema temporal	13
2.2.1.1. Esquema de Proyección	14
2.2.2. Esquema espacial	16
2.2.2.1. Aproximación de Galerkin Fourier	16
2.2.2.2. Método de Chebyshev-colocación	17
2.3. Soluciones estacionarias a través del método de Newton	18
2.4. Método de continuación	20
2.4.1. Continuación de soluciones estacionarias para diferentes valores de Rayleigh	20
2.4.2. Continuación de soluciones estacionarias para diferentes valores de Ω	21
2.5. Análisis de estabilidad lineal de soluciones estacionarias	22
2.6. Refinamiento de valores y vectores propios	23
3. Convección natural en un cilindro horizontal	25
3.1. Introducción	25
3.2. Objetivos del capítulo. Metodología.	28
3.3. Resultados	29
3.3.1. Estado básico	29

3.3.2.	Estabilidad lineal para $Pr = 0.00715$ y $\Gamma \in [1.5, 2.5]$	31
3.3.3.	Estabilidad lineal para $\Gamma = 2$ y $Pr \in [0, 0.0249]$	33
3.3.4.	Análisis de la energía cinética de la perturbación	37
3.3.5.	Descomposición de las autofunciones en modos de Fourier	39
3.3.6.	Flujos secundarios	45
3.4.	Conclusiones	48
4.	Convección natural en un cilindro horizontal con rotación axial	51
4.1.	Introducción	51
4.2.	Objetivos del capítulo	52
4.3.	Resultados	52
4.3.1.	Estado Básico	52
4.3.2.	Estabilidad lineal del flujo básico para $0 < \Omega < 5$	59
4.3.2.1.	Estabilidad lineal para $\Omega \approx 3.45$	63
4.3.2.2.	Estabilidad lineal para $\Omega \approx 4.5$	66
4.3.3.	Soluciones secundarias	68
4.4.	Conclusiones	74
5.	Medidas de coeficientes de difusión.	77
5.1.	Introducción	77
5.2.	Objetivos del capítulo	80
5.3.	Procedimiento y selección de número de puntos de malla	81
5.3.1.	Parámetro δ	82
5.4.	Resultados	83
5.4.1.	$\%D$ en función de número de Rayleigh para $\alpha = 90^\circ$ ($\mathbf{g} = g_x \mathbf{i}$)	83
5.4.2.	$\%D(t_{end})$ en función de las variaciones del vector de gravedad $\mathbf{g} = g_x \hat{\mathbf{x}} + g_z \hat{\mathbf{z}}$ con respecto al gradiente de densidad inicial	84
5.4.3.	$\%D(t_{end})$ según la frecuencia de vibraciones gravitatorias $\mathbf{g} = g_x(t) \mathbf{i} = \text{Acos}(2\pi ft) \mathbf{i}$	86
5.4.4.	$\%D(t_{end})$ según la velocidad angular Ω .	88
5.4.5.	Implicaciones para los experimentos de difusión realizados en la Estación Espacial Internacional. Determinación de $\%D$ en función de un número de Rayleigh vectorial $\mathbf{Ra} = Ra_x \mathbf{i} + Ra_y \mathbf{j} + Ra_z \mathbf{k}$	89
5.5.	Conclusiones	93
6.	Conclusiones	95
	Lista of Figuras	98
	Lista of Tablas	105
A.	Anexo	107
A.1.	Coordenadas Cilíndricas	107
A.2.	Método de Residuo Mínimo Generalizado: GMRES	108
A.3.	Método de Arnoldi	108
	Bibliografía	110

Nomenclatura

g	aceleración de la gravedad
\mathbf{u}	vector del campo de velocidad
T	temperatura
t	tiempo
T_c	temperatura de la tapa fría
T_h	temperatura de la tapa caliente
C	concentración
\mathbf{F}	vector de fuerza másica por unidad de volumen
R	radio del cilindro
H	longitud del cilindro
D	coeficiente de difusión
C_0^*	valor medio de la concentración
C_0	concentración del fluido menos denso
C_1	concentración del fluido más denso
Ra	número de Rayleigh
Pr	número de Prandtl
Sc	número de Smidth
α	coeficiente de expansión térmica
β	coeficiente de expansión solutal
Γ	parámetro de forma: cociente entre longitud y el diámetro del cilindro
ΔC	diferencia de concentración en $t = 0$
ΔT	diferencia de temperatura $T_h - T_c$
κ	difusividad térmica
μ	viscosidad dinámica
ν	viscosidad cinemática
ρ	densidad

ρ_0	densidad de referencia
Ω	velocidad angular
(N, M, K)	número de puntos usados en las coordenadas radial, azimutal y axial respectivamente
(x, y, z)	variables independientes en sistema de coordenadas cartesianas
(r, θ, z)	variables independientes en sistema de coordenadas cilíndricas
LC	técnica experimental del capilar largo
SC	técnica experimental de las celdas de cizalladura
ISS	siglas en inglés de Estación Espacial Internacional
t_{end}	tiempo final de difusión

Capítulo 1

Introducción

1.1. Motivación.

Esta tesis está dedicada a modelizar procesos de transporte convectivo por transferencia de calor y masa en un fluido newtoniano incompresible en dominios cilíndricos. El estudio de estos problemas de transporte son relevantes para aplicaciones que surgen en la investigación y en la industria.

La convección natural es el movimiento del fluido provocado por el gradiente de densidad en presencia de un campo gravitatorio. Los gradientes de densidad en el fluido pueden estar causados por transferencia de calor desde una superficie en contacto con el fluido o por variaciones de concentración al poner en contacto dos fluidos de distintas concentraciones. Un ejemplo de convección debido a variaciones térmicas ocurre en un fluido dentro de un contenedor rectangular cerrado entre cuyas paredes planas verticales hay una diferencia de temperatura. Si la pared plana calentada está colocada horizontalmente debajo del fluido ocurre la conocida convección de Rayleigh-Benard.

La velocidad del movimiento convectivo depende, entre otros factores, de las constantes físicas del fluido como es la densidad ρ , viscosidad cinemática ν , conductividad térmica κ , coeficientes de expansión solutal β y térmico α , etc. La dinámica de estos procesos de transporte es caracterizada por constantes adimensionales que dependen de las propiedades del fluido y de las variables iniciales del problema (masa, longitud, tiempo, temperatura, concentración, etc). Ejemplo de constantes adimensionales son el número de Rayleigh Ra , el número de Prandtl Pr o el número de Schmidt Sc .

- Convección natural en cilindros horizontales con calentamiento lateral

Los problemas de transporte convectivo con calentamiento lateral son de gran interés en aplicaciones industriales como es el caso de la fabricación de cristales semiconductores mediante el método de Bridgman horizontal [Garandet and T. Alboussière, 1999, Dost and Lent, 2007]. En este método aparece un flujo convectivo inducido por la diferencia de temperatura entre las dos fronteras que limitan la zona líquida. Modelizar esta zona del fluido donde ocurre este flujo, así como conocer su

comportamiento para diferentes materiales, con distintas condiciones de calentamiento y tamaño del contenedor resulta importante para el control del proceso.

Muchos investigadores han simulado numéricamente la configuración horizontal de Bridgman en función de distintos parámetros dependientes de las propiedades del fluido y de las condiciones de contorno térmica y de la velocidad, así como para distintas configuraciones de contenedores utilizando geometrías simples desde un canal bidimensional infinito [Hart, 1972] a cajas rectangulares 2D [Gelfgat et al., 1999a,b, Mercader et al., 2005].

Aunque las aproximaciones bidimensionales dan resultados significativos, las geometrías tridimensionales en dominios acotados son más realistas debido a que los campos de velocidad y temperatura son totalmente tridimensionales. Por ejemplo en simulaciones en cajas bidimensionales se observa que puede existir estados estacionarios con más de un rollo convectivo para valores del parámetro de forma mayores que 2. Sin embargo esto no se observa en los estudios en cajas 3D o cilindros para iguales parámetros.

Destacamos dentro de los trabajos de cajas rectangulares 3D los realizados por Bucchignani and Mansutti [2000], Juel et al. [2001], Hof et al. [2004], Henry and Ben Hadid [2007a] y en configuraciones cilíndricas horizontales Lyubimov et al. [2010], Vaux et al. [2006]. De la configuración del cilindro horizontal se han encontrado pocos resultados en el que se estudie tan amplio rango de valores de las constantes adimensionales, Rayleigh y el Prandtl, como el que mostraremos en este trabajo. Estudiaremos cómo para distintos valores de estos parámetros cambia el tipo de la primera transición del flujo.

También incluiremos en esta investigación el efecto de la rotación axial del cilindro. Se conoce de trabajos anteriores [Fujiwara et al., 1998, Zhao et al., 1998] que la rotación del cilindro frena el movimiento convectivo, desviando la trayectoria del flujo en la dirección de la rotación hasta que para determinado valor de la velocidad angular todo el fluido rota junto con la pared del cilindro como un sólido rígido. En el trabajo que realizaremos analizaremos el cambio en el comportamiento que experimenta tanto el campo de velocidad como la temperatura del flujo desde cero hasta valores moderados de la velocidad angular.

En este trabajo de tesis nos hemos centrado en la configuración del cilindro horizontal en dos problemas: 1) un cilindro horizontal diferencialmente calentado en las tapas verticales y 2) un cilindro horizontal diferencialmente calentado en las tapas verticales y con rotación alrededor de su eje.

- Convección natural en experimentos de difusión

También ocurre un proceso convectivo en los experimentos de difusión que se realizan en tubos a muy altas temperaturas, donde necesariamente se parte de una muestra con un gradiente de concentración perpendicular al vector de gravedad. Si el experimento se realiza en condiciones terrestres el gradiente de densidad genera un movimiento manejado por las fuerzas de flotación. Este transporte convectivo

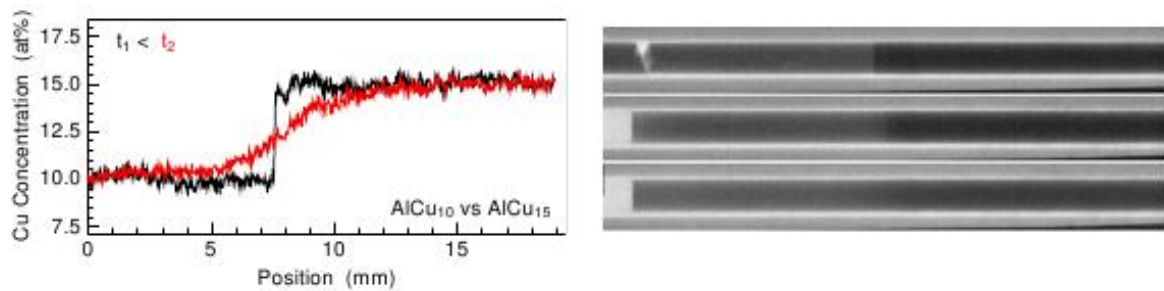


Figura 1.1: (izquierda) Concentración de Cu en función de la posición en un experimento de difusión en dos diferentes tiempos $t_2 > t_1$. (derecha) Imágenes grabadas de las radiografías tomadas en tres momentos del experimento de difusión donde t_1 corresponde a la imagen de arriba y t_2 la última imagen [Kargl et al., 2011]

contamina el resultado de los experimentos dando un valor de difusividad solutal aparente que siempre es más grande que el coeficiente de difusividad real.

Para frenar la contaminación convectiva se emplean diferentes procedimientos que mencionaremos brevemente. El uso de tubos llamados capilares que por su diámetro pequeño ($\approx 1\text{mm}$) dificultan el transporte convectivo [Müller and Müller-Vogt, 2003]. Otro procedimiento es dividir el capilar en pequeñas porciones de igual tamaño (shear cells) que, justo antes de enfriar la muestra, rotan perpendicularmente al eje del capilar. Para medir la concentración *post-mortem* de una muestra de metales líquidos a altas temperaturas es necesario solidificarla bajando gradualmente la temperatura. Esto provoca un gradiente de temperatura radial que genera convección. La división de la muestra en pequeñas porciones ayuda a mantener el perfil de concentración alcanzado antes del enfriamiento [Roşu-Pflumma et al., 2009]. No obstante, la operación de rotación de las celdas crea perturbaciones y los coeficientes medidos con este método tienen un error intrínseco por dicho método a diferencia del método de capilar largo [Yang et al., 2004]. Surge entonces la necesidad de crear un método alternativo, el cual consiste en visualizar el experimento *in situ* tomando radiografías por rayos-x del capilar largo. De la radiografía se obtiene un perfil de intensidad en la escala de grises a lo largo del eje del capilar que es transformado a un perfil de concentración al compararlo con concentraciones de referencia (ver Figura 1.1) [Kargl et al., 2011, Zhang et al., 2010, Griesche et al., 2010].

Muchos experimentos se realizan en condiciones de baja gravedad para disminuir las fuerzas de flotación. Los laboratorios experimentales situados en plataformas en órbita aunque ofrecen un ambiente con fuerzas de gravedad reducidas en ellos existen perturbaciones conocidas como *g-jitter*. El *g-jitter* son aceleraciones periódicas de gran amplitud cuyo espectro de frecuencia está en el rango desde mHz hasta 100Hz, que provienen de las actividades propias de la plataforma espacial como son la conexión y desconexión de módulos y propulsores, actividades de la tripulación, etc. [Smith et al., 2004]. Es necesario aún esclarecer la influencia de estas perturbaciones en los experimentos de difusión y determinar qué error introducen en los coeficientes de difusión medidos.

Nuestro trabajo será reproducir numéricamente el proceso difusivo en las condiciones de baja gravedad dentro de un capilar sometido a perturbaciones que originan flujos convectivos. De estos resultados

determinar el error en el coeficiente de difusión al compararlo con el coeficiente difusivo teórico obtenido de la Ley de Fick.

Métodos numéricos

Para modelizar numéricamente la convección natural es necesario resolver un sistema de ecuaciones acopladas con condiciones de contorno apropiadas, cuya solución nos da el campo de velocidad y temperatura o concentración en el dominio. Empleamos las ecuaciones de Navier Stokes para un fluido incompresible y viscoso acoplada a una ecuación para la temperatura o la concentración en coordenadas cilíndricas. Las ecuaciones se escriben en la aproximación de Boussinesq en el sistema de referencia de laboratorio. Se deducen las condiciones de contorno en las tapas y las paredes horizontales para la velocidad y la temperatura/concentración y condiciones iniciales para la concentración. Se analizan las simetrías del problema.

Estas ecuaciones, una vez discretizadas espacialmente mediante un método pseudoespectral de Chebyshev-colocación para las variables radial y axial y el método Galerkin-Fourier para la variable azimutal, son resueltas con un algoritmo de segundo orden de paso de tiempo fraccionario semi-implícito (explícito para el término no lineal e implícito para el resto) propuesto por Hughes and Randriamampianina [1998] y adaptado al contexto de las coordenadas cilíndricas por Mercader et al. [2010]. El paso de tiempo fraccionario consiste en 1) calcular de las ecuaciones derivadas de las ecuaciones de Navier Stokes y de la condición de incompresibilidad un predictor para la presión con una condición de contorno de Neuman; 2) calcular un predictor para la velocidad de la ecuación de momentum donde se incluye el predictor para la presión obtenido anteriormente y finalmente 3) se corrigen ambos valores haciendo una evaluación explícita del campo de velocidad no divergente.

Se considera la expansión de Chebyshev en la coordenada radial tomando un número par de puntos de colocación distribuidos en el diámetro del cilindro $[-R, R]$ (R radio del cilindro) para evitar la singularidad en el origen y evitar excesiva acumulación de puntos cercanos al centro. Como consecuencia de esta expansión los coeficientes de Fourier de las variables se adaptan para que cumplan con determinadas condiciones de paridad. En cada paso de tiempo para cada modo de Fourier se resuelve un conjunto de ecuaciones de Helmholtz-Poisson para las variables radial y azimutal mediante una técnica de diagonalización.

La integración temporal del sistema de ecuaciones del problema puede ser un proceso costoso por el tiempo que consume hasta que la solución alcanza un estado estacionario. Una vía alternativa para calcular las soluciones estacionarias es un algoritmo que emplea el método de Newton, donde el código semi-implícito de segundo orden es adaptado a uno de primer orden temporal explícito [Mamun and Tuckerman, 1995, Bergeon et al., 1998]. Esto convierte el sistema de ecuaciones en un nuevo sistema preconditionado que facilita la convergencia más rápida de las soluciones. El preconditionador de las ecuaciones del estado estacionario es el de Stokes. El algoritmo para encontrar las soluciones estacionarias es un método iterativo que usa el paquete de rutinas GMRES [Saad and Schultz, 1986,

Frayssé et al., 2005] que trabaja bien con pasos de tiempo grandes. Una ventaja de este método es que la matriz jacobiana no necesita ser construida ni guardada.

Una vez que es obtenida una solución estacionaria se investiga su estabilidad lineal usando el sistema de ecuaciones linealizado y evaluado en la solución estacionaria de interés. La estabilidad lineal del estado estacionario se determina por el signo de la parte real del autovalor dominante de la matriz jacobiana. Para estimar los autovalores y autovectores dominantes integramos el sistema de ecuaciones linealizado por un largo período de tiempo hasta obtener un vector que contenga los autovectores dominantes. Entonces con los vectores de una cantidad apropiada de pasos de tiempo se construye un subespacio de Krylov transformando los vectores iniciales a un conjunto de vectores linealmente independientes y ortonormalizados que se dan como valores de partida en el método de Arnoldi [Arnoldi, 1951].

1.2. Estructura de la Tesis

El contenido de esta tesis está distribuido en 4 capítulos principales donde se exponen los contenidos siguientes

- Capítulo 2 Ecuaciones y Métodos Numéricos.

Plantearemos las ecuaciones que describen nuestros problemas, así como las técnicas para discretizarlas en el espacio y el tiempo y el método de proyección adaptado a nuestros sistemas de ecuaciones de transporte y de Navier Stokes. Describiremos tres diferentes técnicas numéricas: la primera es la evolución temporal de las soluciones a partir de condiciones iniciales, la segunda es el cálculo de los estados estacionarios y su curva de continuación para diferentes valores de los parámetros característicos y finalmente la determinación de la estabilidad de dichos estados estacionarios. Estas técnicas combinan el código temporal con otros algoritmos de cálculo como son el método de Newton, el GMRES y el método de Arnoldi.

- Capítulo 3 Convección natural en un cilindro horizontal.

Se estudiará la convección natural en un cilindro fijo sometido a una diferencia de temperatura entre sus tapas. El eje del cilindro es perpendicular al vector aceleración de la gravedad $\mathbf{g} = g_x \hat{i}$. El estudio comprende el análisis del flujo básico en función del parámetro de forma Γ , el número de Prandtl Pr y el número de Rayleigh Ra , hasta alcanzar la bifurcación primaria en función de dos de esos parámetros. El número de Prandtl estará en el rango típico de materiales semiconductores y metales fundidos ($Pr \leq 0.026$). El parámetro de forma Γ será mantenido en valores cercanos a 2, barriendo un rango entre 1.5 y 2.5. Calcularemos el flujo básico y analizaremos su estabilidad lineal. Describiremos las propiedades de simetría tanto del flujo básico como de los flujos secundarios, así como el tipo de inestabilidad y el mecanismo físico correspondiente a la transición del flujo. Para problemas con simetrías, existe un método alternativo para detectar las bifurcaciones que rompe alguna de las simetrías del estado básico. Este método consiste en

construir parámetros auxiliares que permiten detectar si las soluciones encontradas mantienen las simetrías. Estos parámetros son iguales a cero siempre que la simetría a la cual están asociados se mantenga. En caso contrario, comenzarán a crecer. Mediante ajustes a este crecimiento se determina la parte real e imaginaria del autovalor dominante.

Mostraremos y describiremos algunos flujos secundarios no lineales originados de las inestabilidades.

- Capítulo 4 Convección natural en cilindros horizontales con rotación axial.

Simularemos la dinámica del fluido en un cilindro horizontal con una diferencia térmica entre sus tapas laterales y con condiciones de contorno adiabáticas en las paredes horizontales. Todo el dominio rota con velocidad constante adimensional Ω alrededor del eje del cilindro.

Analizaremos los campos de velocidad y temperatura para valores bajos de $\Omega \in [0, 8]$, detallando cuál efecto es el dominante en el flujo en cada caso, es decir, entre la convección natural producida por el gradiente térmico perpendicular al vector de gravedad g o la rotación del cilindro. El número de Prandtl ($Pr = 0.01$) y el parámetro de forma ($\Gamma = 2$) serán mantenidos constantes en todos los resultados que se mostrarán en el capítulo. Los valores adimensionales de Ω estarán en el rango $[0, 8]$ aunque nos centraremos en los resultados para el rango $[0, 4.5]$.

Mostraremos las características del estado básico en función de la velocidad angular y haremos el análisis de estabilidad de dicho estado básico mostrando el diagrama de bifurcación en el espacio de parámetros (Ra, Ω) . Finalmente mostraremos y describiremos algunas soluciones secundarias del problema.

- Capítulo 5 Medidas de coeficientes de difusión.

Se valorará la influencia de los bajos niveles de gravedad, así como el efecto de la inclinación y la rotación del capilar, las oscilaciones del campo gravitatorio y la influencia de señales acelerométricas reales en las medidas de los coeficientes de difusión de una mezcla. Se simulará un experimento de difusión en un capilar largo (LC) conteniendo una mezcla binaria. La mezcla binaria tendrá dos concentraciones situadas inicialmente en cada mitad del capilar en configuración de escalón, donde el parámetro de forma del capilar es de $\Gamma = 40$. Los cálculos serán realizados tomando valores típicos de propiedades termofísicas de materiales semiconductores como el silicio y aleaciones metálicas de aluminio. Se comparará estos resultados numéricos para el capilar largo con los resultados obtenidos simulando la técnica experimental *shear cells* con el método de volúmenes finitos, además de que se compararán con los resultados 2D de la literatura.

Capítulo 2

Ecuaciones y Métodos Numéricos

2.1. Ecuaciones del movimiento del fluido

En este capítulo plantearemos las ecuaciones que describen nuestros problemas, así como las técnicas para discretizarlas en el espacio y el tiempo y el método de proyección adaptado a nuestros sistemas de ecuaciones de transporte y de Navier Stokes. Para extraer toda la información sobre el comportamiento del fluido a partir de las ecuaciones de evolución no lineales, así como determinar el mapa de bifurcaciones en el espacio de parámetros del sistema, emplearemos tres diferentes técnicas numéricas: la primera es la evolución temporal de las soluciones a partir de condiciones iniciales, la segunda es el cálculo de los estados estacionarios y su curva de continuación para diferentes valores de los parámetros característicos y finalmente la determinación de la estabilidad de dichos estados estacionarios. En [Mamun and Tuckerman, 1995, Chenier et al., 1997, Tuckerman and Barkley, 2000] se exponen una colección de algoritmos numéricos ampliamente usados para resolver problemas relacionados con la dinámica de fluidos y su mapa de bifurcaciones basado en el uso del código de evolución temporal. Estos procedimientos permiten aprovechar la inversión realizada para desarrollar dicho código temporal combinándolo con otros algoritmos de cálculo como son el método de Newton, el GMRES [Saad and Schultz, 1986, Frayssé et al., 2005] y el método de Arnoldi [Arnoldi, 1951].

2.1.1. Ecuaciones de Navier Stokes y transporte de energía

Consideremos un fluido incompresible newtoniano contenido en un cilindro cuyo eje es perpendicular al vector fuerza de gravedad y entre cuyas tapas verticales hay una diferencia de temperaturas (Figura 2.1). La dinámica del fluido en el dominio cilíndrico Σ es gobernada por las ecuaciones de Navier Stokes en tres dimensiones acoplada a una ecuación de transporte de energía para el campo

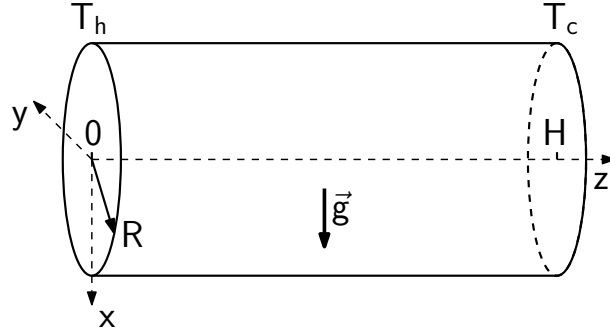


Figura 2.1: Configuración del cilindro horizontal con calentamiento lateral y la disposición de los ejes coordenados. El vector fuerza de gravedad es paralelo al eje x .

de velocidades $\mathbf{u} = (v_x(x, y, z, t), v_y(x, y, z, t), v_z(x, y, z, t))$ y la temperatura $T = T(x, y, z, t)$:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.1a)$$

$$\rho(\partial_t \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{F}, \quad (2.1b)$$

$$\partial_t T + (\mathbf{u} \cdot \nabla) T = \kappa \nabla^2 T, \quad (2.1c)$$

donde μ es la viscosidad dinámica, κ es la difusividad térmica y ρ es la densidad. Estas ecuaciones han sido derivadas de la 2da. Ley de Newton y en su deducción se han considerado los principios de conservación de masa, momentum y energía. Usamos la aproximación de Boussinesq, la cual establece lo siguiente: las variaciones de la densidad pueden ser despreciadas excepto cuando ellas están acopladas a la aceleración de la gravedad g en el término de la fuerza de Arquímedes $\mathbf{F} = \rho g \hat{\mathbf{x}}$ en las ecuaciones de momentum ($\hat{\mathbf{x}}$ es el vector unitario en la dirección x). Las fluctuaciones de la densidad, que dependen principalmente de los efectos térmicos, es supuesta como una aproximación lineal de la temperatura alrededor de una temperatura de referencia T_c en ($z = H$) con densidad ρ_c y es expresada como $\rho = \rho_c(1 - \alpha(T - T_c))$, donde $\alpha = -(\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial T})|_c$.

Las ecuaciones sin dimensiones se obtienen introduciendo escalas de referencia para la longitud, el tiempo y la temperatura. Tomamos como longitud característica $\hat{L} = 2R$, donde R es el radio del cilindro, el tiempo característico $\hat{t} = \frac{\hat{L}^2}{\kappa}$ y la temperatura característica será la diferencia de temperatura entre ambas paredes verticales $\Delta T = T_h - T_c$. Además consideramos que está compuesta por dos términos, una parte lineal y una fluctuación representada por Θ

$$T = T_c + \Delta T \left(1 - \frac{z}{H} + \Theta\right)$$

Aplicando dichos cambios en (2.1), las ecuaciones de Navier Stokes sin dimensiones son

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.2a)$$

$$\partial_t \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla P + Pr \nabla^2 \mathbf{u} + RaPr \left(\frac{z}{\Gamma} - \Theta \right) \hat{\mathbf{x}}, \quad (2.2b)$$

$$\partial_t T + (\mathbf{u} \cdot \nabla) T = \nabla^2 T, \quad (2.2c)$$

Aquí $\nu = \frac{\mu}{\rho_c}$ y $P = \frac{p}{\rho_c} + \psi$. También usaremos la razón entre la altura y el diámetro del cilindro como parámetro de forma: $\Gamma = \frac{H}{2R}$. Aquí ψ representa un potencial escalar que contiene todos los términos constantes del término de fuerza $-\nabla\psi = g(1 - \alpha\Delta T)$. Aparecen dos parámetros sin dimensiones que describen la convección: el número de Rayleigh $Ra = \frac{\alpha\Delta T g L^3}{\nu\kappa}$ y el número de Prandtl $Pr = \frac{\nu}{\kappa}$. El número de Prandtl es definido como la razón entre la viscosidad cinemática (también conocida como difusividad de momentum) y la difusividad térmica. Nos mide la razón entre la velocidad por la cual el momentum es transferido por viscosidad y la velocidad con que el calor es transferido por conducción. En el caso de los gases este parámetro es cercano a la unidad por lo que la transferencia de energía y momentum son comparables. En metales líquidos este parámetro es mucho menor que la unidad $Pr \ll 1$ lo cual nos indica que el calor difunde mas rápidamente comparado con el momentum. El número de Rayleigh, para nuestro problema, nos da una medida de la intensidad de la fuerza de Arquímedes debida al gradiente térmico contraria a los efectos disipativos como la viscosidad y la difusividad térmica.

Debido a la geometría del dominio del problema reescribimos las ecuaciones en coordenadas cilíndricas, donde el campo de velocidades $\mathbf{u} = (u, v, w)$ y la temperatura se expresarán como funciones de $(r, \theta, z) \in [0, \frac{1}{2}] \times [0, 2\pi] \times [0, \Gamma]$ y los operadores diferenciales se definen en el Anexo A. El vector de fuerza másica $\mathbf{F} = F_x \hat{\mathbf{x}}$, donde $F_x = RaPr \left(\frac{z}{\Gamma} - \Theta \right)$, quedará transformado en coordenadas cilíndricas como

$$\mathbf{F} = F_x [\cos(\theta) \hat{\mathbf{r}} - \sin(\theta) \hat{\boldsymbol{\theta}}]$$

2.1.2. Condiciones de contorno

Nuestro dominio Σ tiene un contorno $\delta\Sigma$ formado por la pared horizontal $\delta\Sigma_1$ y las dos tapas verticales $\delta\Sigma_2$. Para completar estas ecuaciones (3.1), en el sistema de referencia de laboratorio, emplearemos las condiciones de contorno no deslizantes

$$\mathbf{u} = (0, \frac{\Omega}{2}, 0) \quad \text{en} \quad 0 < z < \Gamma, \quad r = 1/2$$

$$\mathbf{u} = (0, \Omega r, 0) \quad \text{en} \quad z = 0 \quad \text{y} \quad z = \Gamma$$

con velocidad angular adimensional Ω . En ambos casos hay condiciones adiabáticas en $\delta\Sigma_1$

$$\partial_r T = \partial_r \Theta = 0 \quad \text{en} \quad r = \frac{1}{2}, \quad 0 < z < \Gamma$$

En $\delta\Sigma_2$ tenemos condiciones de contorno isotérmicas:

$$T = T_h \rightarrow \Theta = 0 \quad \text{en} \quad z = 0$$

$$T = T_c \rightarrow \Theta = 0 \quad \text{en} \quad z = \Gamma$$

2.1.3. Simetrías

2.1.3.1. Cilindro fijo ($\Omega = 0$)

Las ecuaciones (3.1) con las condiciones de contorno dadas en Sec. 2.1.2 con $\Omega = 0$ son equivariantes bajo el grupo de simetrías G que comprende 4 tipos de transformaciones $\{I, R_1, R_2, R_3\}$. Aquí I representa la transformación identidad, R_1 es una reflexión con respecto al plano vertical L_v por $y = 0$. R_2 es una reflexión respecto al punto situado en el centro del cilindro $(x, y, z) = (0, 0, \Gamma/2)$ y R_3 , es el producto de las dos transformaciones anteriores y se interpreta como una reflexión sobre la línea $x = 0, z = \Gamma/2$. Este grupo de simetrías G lo conforman tres subgrupos $\{I, R_1\}$, $\{I, R_2\}$ y $\{I, R_3\}$, los cuales son diferentes pero isomorfos a Z_2 . Si combinamos dos de los tres subgrupos Z_2 , podemos escribir $G = Z_2 \otimes Z_2 \equiv D_2$, donde \otimes nos indica el producto directo de los grupos y D_2 es el grupo diedral $D_2 = \{I, R_1, R_2, R_1 R_2\}$. Cada elemento de cualquiera de los grupos conmuta con cada elemento del otro grupo.

Estas transformaciones actúan en las componentes cilíndricas del campo de velocidades y la desviación de la temperatura u, v, w, Θ de la siguiente forma

$$R_1 : (r, \theta, z) \rightarrow (r, -\theta, z), \quad (u, v, w, \Theta) \rightarrow (u, -v, w, \Theta) \quad (2.3a)$$

$$R_2 : (r, \theta, z) \rightarrow (r, \theta + \pi, \Gamma - z), \quad (u, v, w, \Theta) \rightarrow (u, v, -w, -\Theta) \quad (2.3b)$$

$$R_3 : (r, \theta, z) \rightarrow (r, \pi - \theta, \Gamma - z), \quad (u, v, w, \Theta) \rightarrow (u, -v, -w, -\Theta). \quad (2.3c)$$

Si lo expresamos en coordenadas cartesianas estas transformaciones actúan como

$$R_1 : (x, y, z) \rightarrow (x, -y, z), \quad (v_x, v_y, v_z, \Theta) \rightarrow (v_x, -v_y, v_z, \Theta)$$

$$R_2 : (x, y, z) \rightarrow (-x, -y, \Gamma - z), \quad (v_x, v_y, v_z, \Theta) \rightarrow (-v_x, -v_y, -v_z, -\Theta)$$

$$R_3 : (x, y, z) \rightarrow (-x, y, \Gamma - z), \quad (v_x, v_y, v_z, \Theta) \rightarrow (-v_x, v_y, -v_z, -\Theta).$$

Estas transformaciones convierten soluciones en soluciones, es decir la equivarianza de las ecuaciones y condiciones de contorno significa que si tenemos la solución

$$\Psi = (u(r, \theta, z), v(r, \theta, z), w(r, \theta, z), \Theta(r, \theta, z))$$

y le aplicamos la transformación

$$R_1\Psi = (u(r, -\theta, z), -v(r, -\theta, z), w(r, -\theta, z), \Theta(r, -\theta, z))$$

obtenemos también una solución del problema. Aunque estas dos soluciones se obtienen una de la otra a través de R_1 no son necesariamente iguales y se llaman conjugadas R_1 . Igual sucede para las otras dos transformaciones R_2 y R_3 .

2.1.3.2. Cilindro con rotación axial ($\Omega \neq 0$)

Si el cilindro rota axialmente con velocidad angular Ω las simetrías del problema cambian. Las (2.3) representan el grupo de simetrías del sistema (3.1) con condiciones de contorno homogéneas. Nuestro sistema con rotación axial ($\Omega \neq 0$) es ahora invariante sólo bajo un subgrupo Λ de G . Este subgrupo Λ está formado por la simetría de reflexión $Z_2 = \{I, R_2\}$ descrita en (2.3b). Un problema con simetría similar a este lo encontramos en [Mercader et al., 2005] donde un rectángulo con un gradiente térmico entre las paredes verticales es estudiado.

2.1.4. Ecuaciones de Navier Stokes y transporte de masa

Para modelar el proceso difusivo que estudiamos en esta tesis consideraremos un fluido newtoniano con dos componentes contenido en un dominio cilíndrico Σ con paredes impermeables y en condiciones isotérmicas. La configuración inicial del sistema es modelada con dos concentraciones C'_1 y C'_0 uniformes en cada mitad de un cilindro con orientación arbitraria con respecto al vector de fuerza de gravedad, donde $C'_1 > C'_0$ (ver Figura 2.2). Debido a la similaridad entre las ecuaciones del problema de transferencia de calor por convección al problema de transferencia de masa por convección podemos utilizar el mismo sistema de ecuaciones (2.1) remplazando el campo de temperatura $T = T(x, y, z, t)$ por el campo de concentración de la componente más densa $C^* = C^*(x, y, z, t)$ y la difusividad térmica κ por la difusividad de masa D

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \tag{2.5a}$$

$$\rho(\partial_t \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{F}, \tag{2.5b}$$

$$\partial_t C^* + (\mathbf{u} \cdot \nabla) C^* = D \nabla^2 C^*, \tag{2.5c}$$

La aproximación de Boussinesq en este problema es considerar la densidad constante ρ_0 excepto en el término del vector de fuerza $\mathbf{F} = \rho \mathbf{g}$, donde \mathbf{g} es el vector de aceleración gravitatoria, en que la densidad ρ depende linealmente de la fluctuación de la concentración alrededor de su valor medio: $C_0^* = \frac{C'_1 + C'_0}{2}$, con densidad ρ_0 y es expresada como

$$\rho = \rho_0[1 + \beta(C^* - C_0^*)]$$

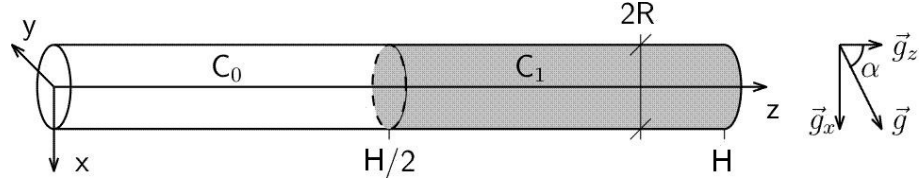


Figura 2.2: Esquema del capilar con la disposición de las dos concentraciones iniciales. $\alpha = 90$ grados si el vector fuerza de gravedad es paralelo al eje x.

donde $\beta = (\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial C})|_0$ y $C'_0 \leq C^* \leq C'_1$. Como en el caso anterior este sistema de ecuaciones (2.5) se adimensionaliza tomando valores característicos para la longitud $\hat{L} = 2R$, el tiempo $\hat{t} = \frac{\hat{L}^2}{D}$ y la diferencia $\Delta C^* = C'_1 - C'_0$ que nos reescala la concentración a

$$C = \frac{C^* - C_0^*}{\Delta C^*}$$

Aplicando las adimensionalizaciones de variables a las ecuaciones (2.5), las ecuaciones de Navier Stokes sin dimensiones son

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.6a)$$

$$\partial_t \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla P + Sc \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{Ra} Sc C, \quad (2.6b)$$

$$\partial_t C + (\mathbf{u} \cdot \nabla) C = \nabla^2 C, \quad (2.6c)$$

Aparecen dos parámetros sin dimensiones que describen la dinámica del fluido que son el número de Rayleigh solutal $\mathbf{Ra} = \frac{\beta \Delta C \mathbf{g} \hat{L}^3}{\nu D}$, el cual es una cantidad vectorial que depende del vector de aceleración gravitacional \mathbf{g} y el número de Schmit $Sc = \frac{\nu}{D}$. El número de Schmidt análogo al número de Prandtl nos permite caracterizar fluidos donde ocurren procesos simultáneos de difusión de masa y momentum. En metales líquidos este parámetro es del orden de $Sc \sim 10^1 - 10^2$. El número de Rayleigh solutal, para nuestro problema, nos da una medida de la intensidad de la fuerza de Arquímedes debida al gradiente de concentración contraria a los efectos disipativos como la viscosidad y la difusividad de masa.

2.1.5. Condiciones de contorno e iniciales

Las ecuaciones (2.6) se completan con las condiciones de contorno no deslizantes e impermeables en todo el contorno

$$\mathbf{u} = 0, \quad \mathbf{n} \cdot \nabla C = 0 \quad \text{en} \quad \delta \Sigma \quad (2.7)$$

donde \mathbf{n} es el vector normal a la superficie. En $t = 0$ el fluido posee dos concentraciones adimensionales: $C_0 = -0.5$ y $C_1 = 0.5$, situadas en cada una de las mitades del cilindro en una configuración de escalón (Figura 2.2). Este escalón ha sido aproximado por:

$$C(r, \theta, z, 0) = 0.5 \tanh(\delta [\frac{2z}{\Gamma} - 1]), \quad z = [0, \Gamma] \quad (2.8)$$

es decir, el paso discontinuo entre las dos concentraciones ha sido suavizado tomando un perfil descrito por una función tangente hiperbólica, cuyo parámetro δ será detallado en Cap. 5. Llamamos posición estable a la posición del cilindro en que el gradiente de concentración y el vector aceleración de la gravedad son paralelos y en la misma dirección ($\alpha = 0^\circ$)

2.2. Discretización Numérica. Algoritmo de predicción corrección

La resolución numérica de las ecuaciones (3.1) o (2.6) se encuentra con el problema de que no existe una ecuación de evolución ni condiciones de contorno para la presión. Entre los métodos empleados para resolver este inconveniente están los de tipo predicción-corrección o de paso fraccionario donde se realizan varios subpasos de cálculo en cada paso de tiempo [Hughes and Randriamampianina, 1998]. Estos métodos usan una combinación de la ecuación de continuidad y de momentum obteniendo un predictor para la presión consistente con el campo de velocidad sin divergencia en cada paso de tiempo. Estos algoritmos también son conocidos como métodos de proyección [Brown et al., 2001].

A la vez estos algoritmos pueden ser explícitos, implícitos o semi-implícitos (mezcla de algoritmos implícitos y explícitos), en dependencia de cómo se traten todos o algunos de los términos de las ecuaciones en cada paso de tiempo. Los implícitos resuelven un problema de frontera no lineal en cada paso de tiempo, por lo que son más costosos computacionalmente, mientras que los semi-implícitos tratan el término no lineal de forma explícita y resuelven un conjunto de ecuaciones de Helmholtz y Poisson en cada paso de tiempo [Boyd, 2001].

El algoritmo numérico empleado consta del uso de una técnica de paso fraccional de segundo orden para la discretización temporal mientras que la discretización espacial consta de expansiones de Galerkin-Fourier para la dirección azimutal y el método de colocación de Chebyshev para la discretización en la dirección radial y axial [Mercader et al., 2010]. En la próxima sección lo describiremos con más detalle.

2.2.1. Esquema temporal

Usaremos un algoritmo semi-implícito donde trataremos el término no lineal de forma explícita mientras que los términos lineales se manejan implícitamente. En cada paso de tiempo haremos tres subpasos: los dos primeros para calcular los predictores y el tercero para corregir; seleccionando adecuadamente la longitud del paso de tiempo ($\Delta t = t^{n+1} - t^n$) para garantizar la estabilidad. Nuestro algoritmo es una combinación de un esquema de segundo orden Backward-Differentiation para la

derivada temporal con un tratamiento explícito del término advectivo usando un esquema de Adams-Bashfort [Boyd, 2001]

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0, \quad (2.9a)$$

$$\frac{3\mathbf{u}^{n+1} - 4\mathbf{u}^n + \mathbf{u}^{n-1}}{2\Delta t} = -2N(\mathbf{u}^n) + N(\mathbf{u}^{n-1}) - \nabla P^{n+1} + \sigma \nabla^2 \mathbf{u}^{n+1} + F^{n+1}(\phi), \quad (2.9b)$$

$$\frac{3\phi^{n+1} - 4\phi^n + \phi^{n-1}}{2\Delta t} = -2N(\mathbf{u}^n, \phi^n) + N(\mathbf{u}^{n-1}, \phi^{n-1}) + \nabla^2 \phi^{n+1}, \quad (2.9c)$$

Por similitud de los sistemas de ecuaciones (3.1) y (2.6) usaremos el símbolo ϕ para representar la temperatura T o la concentración C y σ representando a Pr o Sc .

2.2.1.1. Esquema de Proyección

Seguiremos el algoritmo propuesto en [Hughes and Randriamampianina, 1998] y adaptado e implementado eficientemente en [Mercader et al., 2010, 2014]. Se calcula un predictor para la presión consistente con un campo de velocidad libre de divergencia en cada paso de tiempo, partiendo de la ecuación de momentum y con una condición de contorno consistente lo cual permite que haya variación en el gradiente de presión en la frontera.

En un primer paso temporal combinamos (2.9a) y (2.9b) y hallamos un valor provisional para la presión \hat{P}^{n+1} con una condición de frontera de Neumann. En un segundo paso hallamos un valor provisional para la velocidad $\hat{\mathbf{u}}^{n+1}$. Finalmente en el paso **corrector** actualizamos la presión P^{n+1} y el campo de velocidad libre de divergencia \mathbf{u}^{n+1} .

- Inicialmente, partiendo de 2.9c hallamos el valor de ϕ^{n+1} de la ecuación tipo Helmholtz

$$\left(\frac{3}{2\Delta t} - \nabla^2\right)\phi^{n+1} = \frac{4\phi^n - \phi^{n-1}}{2\Delta t} - 2N(\mathbf{u}^n, \phi^n) + N(\mathbf{u}^{n-1}, \phi^{n-1}) \quad \text{en} \quad \Sigma,$$

con las condiciones de contorno en $\delta\Sigma$ ya explicadas en Sec. 2.1.2 para la temperatura T o Sec. 2.1.5 para la concentración C según el problema que se trate.

- Para obtener la ecuación para el predictor de la presión \hat{P}^{n+1} tomamos la divergencia de (2.9b)

$$\nabla \cdot \left[\frac{3\mathbf{u}^{n+1} - 4\mathbf{u}^n + \mathbf{u}^{n-1}}{2\Delta t} \right] = \nabla \cdot [-2N(\mathbf{u}^n) + N(\mathbf{u}^{n-1}) - \nabla \hat{P}^{n+1} + \sigma \nabla^2 \mathbf{u}^{n+1} + F^{n+1}(\phi)],$$

Reordenando la anterior expresión, teniendo en cuenta que $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$, nos encontramos con la siguiente ecuación de Poisson para el predictor de la presión \hat{P}^{n+1} en Σ , donde el término $(\nabla \cdot \nabla^2 \mathbf{u}^{n+1})$ será tenido en cuenta en el paso fraccionado posterior [Hughes and Randriamampianina, 1998].

$$\nabla^2 \hat{P}^{n+1} = \nabla \cdot [-2N(\mathbf{u}^n) + N(\mathbf{u}^{n-1}) + F^{n+1}(\phi)] \quad \text{en} \quad \Sigma,$$

Para la condición de contorno consistente, siguiendo [Karniadakis et al., 1991], obtenemos la derivada normal de la presión a partir de la ecuación (2.9b), en la que reemplazamos el término de difusión $\nabla^2 \mathbf{u}$ por la identidad vectorial $\nabla^2 \mathbf{u} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) - \nabla \times \nabla \times \mathbf{u}$ y adoptamos un esquema implícito en la parte irrotacional y uno explícito de segundo orden Adams-Bashforth para la parte solenoidal, obteniendo la siguiente expresión en $\delta\Sigma$

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \hat{P}^{n+1} = \mathbf{n} \cdot \left[\frac{-3\mathbf{u}^{n+1} + 4\mathbf{u}^n - \mathbf{u}^{n-1}}{2\Delta t} - 2N(\mathbf{u}^n) + N(\mathbf{u}^{n-1}) - 2\sigma \nabla \times \nabla \times \mathbf{u}^n + \sigma \nabla \times \nabla \times \mathbf{u}^{n-1} + \mathbf{F}^{n+1}(\phi) \right] \quad \text{en} \quad \delta\Sigma \quad (2.10)$$

- Incluyendo el \hat{P}^{n+1} obtenido podemos obtener un predictor para la velocidad $\hat{\mathbf{u}}$ resolviendo

$$\left(\nabla^2 - \frac{3}{2\sigma\Delta t} \right) \hat{\mathbf{u}} = -\frac{1}{\sigma} \left(\frac{4\mathbf{u}^n - \mathbf{u}^{n-1}}{2\Delta t} - 2N(\mathbf{u}^n) + N(\mathbf{u}^{n-1}) - \nabla \hat{P}^{n+1} + \mathbf{F}^{n+1}(\phi) \right) \quad \text{en} \quad \Sigma$$

con $\hat{\mathbf{u}}$ satisfaciendo las condiciones de contorno en $\delta\Sigma$ descritas en Sec. 2.1.5.

Observamos que en el operador laplaciano en coordenadas cilíndricas existe un acoplamiento entre las variables u y v

$$\partial_r^2 u + r^{-2} \partial_\theta^2 u + \partial_z^2 u + r^{-1} \partial_r u - \frac{2}{r^2} \partial_\theta v - \frac{u}{r^2} \quad \partial_r^2 v + r^{-2} \partial_\theta^2 v + \partial_z^2 v + r^{-1} \partial_r v + \frac{2}{r^2} \partial_\theta u - \frac{v}{r^2}$$

Por eso antes de calcular la predicción para la velocidad hacemos una transformación de variables y ecuaciones que permita desacoplarlas. Emplearemos las siguientes expresiones

$$u + iv = u_+ \quad (2.11)$$

$$u - iv = u_- \quad (2.12)$$

de forma tal que en las nuevas ecuaciones el operador laplaciano se expresará

$$\begin{aligned} \partial_r^2 u_+ + r^{-2} \partial_\theta^2 u_+ + \partial_z^2 u_+ + r^{-1} \partial_r u_+ + \frac{2i}{r^2} \partial_\theta u_+ - \frac{u_+}{r^2} \\ \partial_r^2 u_- + r^{-2} \partial_\theta^2 u_- + \partial_z^2 u_- + r^{-1} \partial_r u_- - \frac{2i}{r^2} \partial_\theta u_- - \frac{u_-}{r^2} \end{aligned}$$

Una vez calculada $\hat{\mathbf{u}}$ retornamos a las variables originales

$$u = \frac{u_+ + u_-}{2}, v = \frac{u_+ - u_-}{2i}$$

- Ahora obtenemos P^{n+1} y \mathbf{u}^{n+1} a partir de los predictores resolviendo el sistema

$$\frac{3(\mathbf{u}^{n+1} - \hat{\mathbf{u}})}{2\Delta t} = -\nabla(P^{n+1} - \hat{P}^{n+1}) \quad \text{en} \quad \hat{\Sigma} = \Sigma \cup \delta\Sigma \quad (2.13)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0 \quad \text{en} \quad \Sigma \quad (2.14)$$

con $\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{u}} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}^{n+1} \quad \text{en} \quad \delta\Sigma$

Usamos una variable intermedia ψ para obtener los valores corregidos

$$\psi = \frac{2\Delta t}{3} (P^{n+1} - \hat{P}^{n+1})$$

Esta función se calcula integrando la ecuación de Poisson que se obtiene al aplicar la divergencia a (2.13) teniendo en cuenta (2.14)

$$\nabla^2 \psi = \nabla \cdot \hat{\mathbf{u}} \quad \text{en} \quad \Sigma$$

con la condición de contorno de Neumann consistente

$$\partial_n \psi = 0 \quad \text{en} \quad \delta \Sigma$$

A partir de ψ obtenemos

$$P^{n+1} = \hat{P}^{n+1} + \frac{3}{2\Delta t} \psi \quad \text{y} \quad \mathbf{u}^{n+1} = \hat{\mathbf{u}} - \nabla \psi$$

La solución encontrada satisface la condición de divergencia nula pero no satisface las condiciones de contorno exactas para las componentes tangenciales del campo de velocidad.

2.2.2. Esquema espacial

2.2.2.1. Aproximación de Galerkin Fourier

Buscamos una solución que es periódica en la variable espacial θ en el intervalo $(0, 2\pi)$. Para eso aproximaremos las funciones por series de Fourier truncadas. Estas series, para las variables u , v , w y Θ , tienen la forma siguiente

$$(u, v, w, \Theta)(r, \theta, z) = c \sum_{m=-M/2}^{M/2-1} F_m(r, z) e^{i m \theta} \quad (2.15)$$

Aquí M es el número de modos de Fourier de la expansión. Las funciones $F_m(r, z)$ son los coeficientes de la expansión para cada modo m de Fourier, las cuales serán las incógnitas a calcular y serán detalladas en la próxima sección. La constante c tiene un valor de 1 si corresponde a las variables u , w y Θ o es igual a i la unidad imaginaria ($i = \sqrt{-1}$) si corresponde a la variable v . Estas funciones son complejas y cumplen con las propiedades siguientes

$$\begin{aligned} F_0(r, z) &= c f_0(r, z) \\ F_{-M/2}(r, z) &= c f_{M-1}(r, z) \\ F_m(r, z) &= c [f_{2m-1}(r, z) + i f_{2m}(r, z)], \quad \text{for } k = 1 : \frac{M}{2} - 1, \\ F_{-m}(r, z) &= c^2 \bar{F}_m(r, z), \quad \text{for } k = 1 : \frac{M}{2} - 1 \end{aligned}$$

La barra superior en F significa complejo conjugado. En las ecuaciones del algoritmo descrito anteriormente, que se resuelven en cada paso, aparecen como incógnitas sólo las partes reales $f_{2m-1}(r, z) \in \mathbb{R}$ o las partes imaginarias $f_{2m}(r, z) \in \mathbb{R}$ de cada modo de Fourier $F_m(r, z)$ de las variables. De igual forma la parte real e imaginaria de la variable auxiliar u_{\pm} en modos de Fourier $(U_{\pm})_m$ depende solo de las partes reales e imaginarias de las variables u y v

$$(U_{\pm})_m(r, z) = u_{2m-1}(r, z) \mp v_{2m-1}(r, z) + i[u_{2m}(r, z) \mp v_{2m}(r, z)] \quad (2.17)$$

donde los índices $2m - 1$ corresponden a la parte real mientras que $2m$ corresponde a la parte imaginaria de las funciones.

2.2.2.2. Método de Chebyshev-colocación

Usaremos los polinomios de Chebyshev [Boyd, 2001] para aproximar los componentes de Fourier $F_m(r, z)$ en las coordenadas r y z en el dominio $(r, z) \in [0, \frac{1}{2}] \times [0, \Gamma]$. Pero el punto $r = 0$ es un punto de indeterminación aparente en las ecuaciones resultantes. Siguiendo el procedimiento de Fornberg [1995] y Trefethen [2001] para evitar la singularidad asociada con la coordenada r , discretizamos sobre el diámetro entre $-\frac{1}{2}$ y $\frac{1}{2}$ tomando un número par de valores en la dirección radial. Para garantizar que el número de puntos en la coordenada radial sea par tomamos el rango de $[0 : 2N + 1]$, donde $N \in \mathbb{N}$, de forma tal que la expansión polinomial tenga $2N + 2$ puntos de colocación. La transformación en la coordenada radial será

$$r_n = \frac{1}{2} \bar{r}_n$$

con $\bar{r}_n = \cos(\frac{n\pi}{2N+1})$ y $n = 0 : N$, mientras que en z tenemos

$$z_k = \frac{\Gamma}{2}(1 - \bar{z}_k)$$

con $\bar{z}_k = \cos(\frac{k\pi}{K})$ y $k = 0 : K$, donde $N + 1$ y $K + 1$ son los números totales de puntos de colocación en cada coordenada. Las funciones $F_m(r, z)$ en (2.15) se representarían en polinomios de Chebyshev T como

$$F_m(r, z) = \sum_{n=0}^N \sum_{k=0}^K a_{n,m,k} T_n(\bar{r}) T_k(\bar{z})$$

donde $a_{n,m,k}$ son los coeficientes de la expansión.

Sin embargo discretizar sobre el diámetro hará que haya una superposición de puntos en la dirección azimutal si tomamos $\theta = (0, 2\pi)$, es decir, un punto situado en $(r, \theta + \pi, z)$ y otro en $(-r, \theta, z)$ representan el mismo punto. Una función escalar evaluada en este punto ha de cumplir $F(r, \theta + \pi, z) = F(-r, \theta, z)$; pero una función vectorial satisfará esta igualdad si las componentes radial y azimutal son antisimétricas debido al cambio de signo de los vectores unitarios de la base \hat{r} y $\hat{\theta}$

$$\hat{r}(r, \theta + \pi, z) = -\hat{r}(-r, \theta, z)$$

$$\hat{\theta}(r, \theta + \pi, z) = -\hat{\theta}(-r, \theta, z)$$

Esto requiere establecer condiciones de paridad para todas las variables [Mercader et al., 2010]. Los coeficientes de Fourier complejos $F_m(r, z)$ de la fluctuación de la temperatura y la componente axial de la velocidad deben tener paridad m y los de las componentes radial y azimutal de la velocidad tendrán paridad $m + 1$.

2.3. Soluciones estacionarias a través del método de Newton

La evolución temporal de la ecuaciones dependientes del tiempo (2.9) pueden converger a estados estacionarios cuando $t \rightarrow \infty$. Reescribiendo nuestro sistema de ecuaciones en forma esquemática

$$\partial_t \mathbf{U} = \mathbf{L}\mathbf{U} + \mathbf{N}\mathbf{U} \quad (2.18)$$

donde \mathbf{N} y \mathbf{L} representan los operadores no lineal y lineal discretizados espacialmente y $\mathbf{U} = [u, v, w, \phi]$ es el vector de variables de las ecuaciones (2.9b) y (2.9c). Una solución estacionaria \mathbf{U}_0 satisface

$$0 = \mathbf{L}\mathbf{U}_0 + \mathbf{N}\mathbf{U}_0 \quad (2.19)$$

Un método más rápido y exacto comparado a la evolución temporal para obtener dichas soluciones estacionarias es el método de Newton. Ejemplos de su aplicación en diversos problemas de la mecánica de fluidos lo podemos encontrar en [Bergeon et al., 1998, Mamun and Tuckerman, 1995, Mercader et al., 2010, LeVeque, 2007]. El objetivo es buscar el cero de una ecuación $f(x) = 0$, partiendo de una aproximación inicial x_0 . Mediante repetidas iteraciones para $k = 0, 1, 2, \dots, m$, donde m es el número máximo de iteraciones permitidas, resolvemos el sistema

$$f'(x_k)\delta x = f(x_k)$$

$$x_{k+1} = x_k - \delta x$$

hasta que $f(x_k) < \epsilon$ donde ϵ es un valor muy pequeño seleccionado inicialmente como criterio de parada y $f'(x_k)$ es el jacobiano de $f(x)$ evaluado en x_k .

Tomando $f(x)$ como $\mathbf{L}\mathbf{U} + \mathbf{N}\mathbf{U}$ en cada iteración debemos resolver el siguiente sistema

$$(\mathbf{L} + \mathbf{N}_{\mathbf{U}})\delta\mathbf{U} = -(\mathbf{L} + \mathbf{N})\mathbf{U} \quad (2.20)$$

$$\mathbf{U} \leftarrow \mathbf{U} - \delta\mathbf{U} \quad (2.21)$$

donde $\delta\mathbf{U}$ es una corrección calculada a partir del sistema (2.18) linealizado. El término $\mathbf{L} + \mathbf{N}_{\mathbf{U}}$ es la matriz jacobiana $\mathbf{J}_{\mathbf{U}}$ de $\mathbf{L} + \mathbf{N}$ evaluado en \mathbf{U} donde el término advectivo $\mathbf{N} = (\mathbf{U} \cdot \nabla)\mathbf{U}$ es substituido por $\mathbf{N}_{\mathbf{U}} = (\mathbf{U} \cdot \nabla)\delta\mathbf{U} + (\delta\mathbf{U} \cdot \nabla)\mathbf{U}$. En vez de (2.20) resolveremos el sistema

precondicionado

$$\mathbf{P}(\mathbf{L} + \mathbf{N}_U)\delta\mathbf{U} = \mathbf{P}(\mathbf{L} + \mathbf{N})\mathbf{U} \quad (2.22)$$

$$\mathbf{U} \leftarrow \mathbf{U} - \delta\mathbf{U} \quad (2.23)$$

Este precondicionamiento es necesario por el hecho de que el número de condición del operador laplaciano ∇^2 , que corresponde a la razón entre el autovalor más grande al más pequeño, es mucho mayor que uno. Este operador laplaciano viene incluido en el término \mathbf{L} de (2.22) y es la causa principal del pobre condicionamiento de $(\mathbf{L} + \mathbf{N}_U)$. Usaremos \mathbf{P} , conocido como el precondicionador de Stokes, el cual representa una aproximación inversa de $(\mathbf{L} + \mathbf{N}_U)$. Su acción se puede calcular fácilmente como detallamos a continuación. Discretizamos (2.18) usando un esquema semi-implícito temporal de Euler de primer orden para valores de parámetros fijos,

$$\frac{\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^n}{\Delta t} = \mathbf{L}\mathbf{U}^{n+1} + \mathbf{N}\mathbf{U}^n \quad (2.24)$$

Podemos transformar el esquema semi-implícito en (2.24) por uno explícito

$$\frac{\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^n}{\Delta t} = ((\mathbf{I} - \Delta t\mathbf{L})^{-1})(\mathbf{L} + \mathbf{N})\mathbf{U}^n \quad (2.25)$$

Tomamos \mathbf{P} como $(\mathbf{I} - \Delta t\mathbf{L})^{-1}$ y \mathbf{I} es la matriz identidad. Vemos que la parte derecha de (2.22) es equivalente a tomar un paso de tiempo del código de evolución temporal

$$\frac{\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^n}{\Delta t}$$

mientras que la izquierda corresponde a un paso de tiempo para las ecuaciones del sistema linealizado

$$\frac{\delta\mathbf{U}^{n+1} - \delta\mathbf{U}^n}{\Delta t}$$

El paso de tiempo Δt usado en este procedimiento, a diferencia de su uso en el código de evolución temporal con valores muy pequeños $\Delta t \ll 1$, aquí es seleccionado solo por criterios de eficiencia no importa cuan grande sea. Hemos usado valores entre $\Delta t \sim 10^4 \dots 10^6$ [Tuckerman and Barkley, 2000]. Algunas pequeñas modificaciones son necesarias hacer en el código de evolución temporal para adaptarlo a un paso temporal de primer orden.

El sistema lineal (2.22), representado esquemáticamente como $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$, será resuelto con un método iterativo avanzado basado en el subespacio de Krylov: el GMRES [Trefethen and Bau, 1997]. Este método permite trabajar con matrices generales no simétricas reales o complejas y no es necesario especificar los elementos de \mathbf{A} ya que se utiliza el producto matriz-vector $\mathbf{A}\mathbf{x}$ y sólo se necesita la acción (ver detalles en [Saad and Schultz, 1986] y en Sec. A.2). Es necesario introducir nuevas variables de control para detener el proceso una vez se alcance la tolerancia deseada.

2.4. Método de continuación

2.4.1. Continuación de soluciones estacionarias para diferentes valores de Rayleigh

El sistema (2.19) lo hemos considerado con valores de parámetros constantes. Si nos interesa trazar la curva de soluciones estacionarias en función de un parámetro característico λ a partir de una solución inicial conocida $\mathbf{U}_0(\lambda)$ podemos emplear el método de continuación. Este método calcula, mediante una combinación de pasos de predicción y corrección, la curva que une un conjunto de soluciones estacionarias de (2.19), ya sean estables o inestables, al variar uno o varios parámetros de las ecuaciones [Allgower and Georg, 2003]. En caso de soluciones estacionarias estables con este algoritmo llegamos a ellas de forma más rápida y evitamos los largos períodos de integración temporal. El método de continuación que empleamos muestra ser eficiente para adaptar continuamente el tamaño del paso y para detectar y continuar puntos especiales de la curva de soluciones como son los nodos *saddle*. Usaremos la iteración de Newton-GMRES para calcular soluciones estacionarias, explicada en la sección anterior (Sec. 2.3), pero con un parámetro variable, en este caso el número de Rayleigh Ra .

La continuación se plantea de la forma siguiente: una vez conocidas dos soluciones estacionarias \mathbf{U}_{k+1} y \mathbf{U}_k para dos valores del parámetro Ra_{k+1} y Ra_k , donde $k = 0, 1, \dots$ queremos calcular una nueva solución estacionaria \mathbf{U}_{k+2} para un nuevo valor Ra_{k+2} . Hallamos un predictor $(\hat{\mathbf{U}}_{k+2}, \hat{Ra}_{k+2})$ usando las soluciones ya obtenidas:

$$\hat{\mathbf{U}}_{k+2} = \mathbf{U}_{k+1} + h(\mathbf{U}_{k+1} - \mathbf{U}_k), \quad (2.26)$$

$$\hat{Ra}_{k+2} = Ra_{k+1} + h(Ra_{k+1} - Ra_k) \quad (2.27)$$

donde h es una variable que define el tamaño de paso predictor y es evaluada mediante la extrapolación lineal a lo largo de la rama de soluciones. Esta solución aproximada $(\hat{\mathbf{U}}_{k+2}, \hat{Ra}_{k+2})$ ahora es corregida mediante iteraciones con el método de Newton hasta que converja a la solución estacionaria de la curva con una exactitud determinada $(\mathbf{L} + \mathbf{N})(\mathbf{U}_{k+2}, Ra_{k+2}) = 0$. Para que este procedimiento sea eficiente en el cálculo de curvas con trayectorias complicadas es necesario tener cuidado en la selección y adaptación del tamaño de paso predictor h , en la implementación eficiente del paso corrector (Método de Newton), entre otros aspectos [Allgower and Georg, 2003].

La iteración de Newton para una función $f(x, \alpha)$ dependiente de un parámetro α es

$$\partial_x f(x_k, \alpha_k) \delta x + \partial_\alpha f(x_k, \alpha_k) \delta \alpha = -f(x_k, \alpha_k) \quad k = 0, 1, \dots, m$$

$$x_{k+1} = x_k - \delta x$$

$$\alpha_{k+1} = \alpha_k - \delta \alpha$$

De la misma forma, nuestro sistema de ecuaciones 2.19 dependiente de Ra

$$(\mathbf{L} + \mathbf{N}_{\mathbf{U}})\delta\mathbf{U} + \mathbf{L}_{Ra}\delta Ra = (\mathbf{L} + \mathbf{N})\mathbf{U} \quad (2.28)$$

$$\mathbf{U} \leftarrow \mathbf{U} - \delta\mathbf{U} \quad (2.29)$$

$$Ra \leftarrow Ra - \delta Ra \quad (2.30)$$

Aquí el término \mathbf{L}_{Ra} se refiere a la derivada Fréchet con respecto a Ra del operador lineal en (3.1).

En el sistema (2.28) debemos tener el mismo número de incógnitas a ambos lados de la igualdad. Esto lo resolvemos fijando el m -ésimo componente del vector \mathbf{U} , que presenta mayor variación al calcular el predictor. Al imponer $\delta\mathbf{U}_m = 0$ la dimensión del número de incógnitas $\dim \delta\mathbf{U}$ tendrá un componente menos. Al incorporar δRa el número de incógnitas permanece igual que $\dim \mathbf{U}$. En forma matricial las ecuaciones preconditionadas (2.28) serán

$$\begin{bmatrix} \mathbf{P}(\mathbf{L} + \mathbf{N}_{\mathbf{U}}) & \mathbf{P}\mathbf{L}_{Ra} \\ e_m^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta\mathbf{U} \\ \delta Ra \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{P}(\mathbf{L} + \mathbf{N})\mathbf{U} \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.31)$$

$$\mathbf{U} \leftarrow \mathbf{U} - \delta\mathbf{U} \quad (2.32)$$

$$Ra \leftarrow Ra - \delta Ra \quad (2.33)$$

donde el vector $e^T = [0 \ 0 \ 0 \dots 1 \dots]$ es nulo excepto el m -ésimo componente.

En cada paso de tiempo evaluaremos (2.31) como

$$\frac{\delta\mathbf{U}^{n+1} - \delta\mathbf{U}^n}{\Delta t} = \frac{\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^n}{\Delta t} \quad (2.34)$$

donde ahora el miembro izquierdo representa un paso de tiempo del operador $\mathbf{L} + \mathbf{N}$ linealizado con respecto de \mathbf{U} y de Ra .

2.4.2. Continuación de soluciones estacionarias para diferentes valores de Ω

Podemos calcular las ramas de soluciones con el método de continuación variando la velocidad angular Ω aplicada en la frontera del cilindro en rotación. Para continuar la curva de soluciones se introduce en un ciclo de predicción-corrección, análogo al procedimiento anterior. Partiendo de soluciones conocidas, se busca un predictor $(\hat{\mathbf{U}}, \hat{\Omega})$ y se corrige por el método de Newton hasta que converja a una nueva solución $(\mathbf{L} + \mathbf{N})(\hat{\mathbf{U}}, \hat{\Omega}) = 0$. Este proceso se repite hasta que se barra todo el intervalo de interés de Ω .

Como la velocidad angular es una variable que aparece en las condiciones de contorno (Sec. 2.1.2) la corrección de la solución aproximada es ligeramente diferente, lo cual detallaremos a continuación. Partiendo del sistema $\mathbf{L}(\mathbf{U}, \Omega) + \mathbf{N}(\mathbf{U}, \Omega)$ planteamos la iteración de Newton de la forma

siguiente

$$(\mathbf{L} + \mathbf{N}_{\mathbf{U}})\delta\mathbf{U} + \partial_{\Omega}(\mathbf{L} + \mathbf{N})\delta\Omega = (\mathbf{L} + \mathbf{N})\mathbf{U} \quad (2.35)$$

$$\mathbf{U} \leftarrow \mathbf{U} - \delta\mathbf{U} \quad (2.36)$$

$$\Omega \leftarrow \Omega - \delta\Omega \quad (2.37)$$

Antes de entrar al ciclo de Newton fijamos el m -ésimo componente con mayor variación del predictor \mathbf{U} y variamos el resto incluyendo $\delta\Omega$. Aproximaremos el segundo sumando en (2.35) por la expresión

$$\partial_{\Omega}(\mathbf{L} + \mathbf{N})\delta\Omega = (\mathbf{L} + \mathbf{N})|_{\Omega+\delta\Omega} - (\mathbf{L} + \mathbf{N})|_{\Omega}$$

Si aplicamos el preconditionador de Stokes a esta expresión, primero evaluamos el operador $\mathbf{P}(\mathbf{L} + \mathbf{N})$ con condiciones de contorno para Ω más su variación $\delta\Omega$, lo cual significa un paso de tiempo del código temporal

$$\frac{\mathbf{U}^{n+1}|_{\Omega+\delta\Omega} - \mathbf{U}^n}{\Delta t}$$

y la otra evaluación de $\mathbf{P}(\mathbf{L} + \mathbf{N})$ para Ω

$$\frac{\mathbf{U}^{n+1}|_{\Omega} - \mathbf{U}^n}{\Delta t}$$

Por consiguiente, la ecuación (2.35) preconditionada es equivalente a calcular en cada paso de tiempo la siguiente expresión

$$\frac{\delta\mathbf{U}^{n+1} - \delta\mathbf{U}^n}{\Delta t} + \frac{\mathbf{U}^{n+1}|_{\Omega+\delta\Omega} - \mathbf{U}^{n+1}|_{\Omega}}{\Delta t} = \frac{\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^n}{\Delta t}$$

2.5. Análisis de estabilidad lineal de soluciones estacionarias

Una vez que hemos calculado una solución estacionaria \mathbf{U} nos interesa analizar su estabilidad. Para valorar la estabilidad de dicha solución partimos de las ecuaciones linealizadas y determinamos el espectro de autovalores y autovectores de la matriz jacobiana $\mathbf{J}_{\mathbf{U}}$ en el plano complejo. Los autovalores que determinan la estabilidad son los dominantes es decir los que tienen mayor parte real. Si el autovalor está en el semiplano derecho la solución es inestable mientras que si está en el semiplano izquierdo es estable bajo perturbaciones infinitesimales. El método de Arnoldi es uno de los métodos más usado para calcular autovalores dominantes de matrices no hermíticas. Siguiendo el procedimiento en [Chenier et al., 1997, 1999] discretizamos las ecuaciones del sistema linealizado con un esquema explícito temporal de Euler de primer orden

$$\frac{\delta\mathbf{U}^{n+1} - \delta\mathbf{U}^n}{\Delta t} = (\mathbf{I} - \Delta t\mathbf{L})^{-1}(\mathbf{L} + \mathbf{N}_{\mathbf{U}})\mathbf{U}^n$$

Haciendo $\mathbf{G} = (\mathbf{I} - \Delta t \mathbf{L})^{-1}(\mathbf{L} + \mathbf{N}_{\mathbf{U}}) = \mathbf{P} \mathbf{J}_{\mathbf{U}}$ y reordenando los términos

$$\delta \mathbf{U}^{n+1} = (\mathbf{I} + \Delta t \mathbf{G}) \delta \mathbf{U}^n = \mathbf{D} \delta \mathbf{U}^n \quad (2.38)$$

Con $\mathbf{D} = \mathbf{I} + \Delta t \mathbf{G}$. Si consideramos $\Delta t \ll 1$ podemos aproximar $\mathbf{D} \approx \exp(\Delta t \mathbf{G})$. Entonces sus autovalores están relacionados de la siguiente forma

$$\lambda(\mathbf{G}) \simeq \frac{1}{\Delta t} \ln(\lambda(\mathbf{D}))$$

donde $\lambda(\mathbf{D})$ y $\lambda(\mathbf{G})$ corresponden a los autovalores de las matrices \mathbf{D} y \mathbf{G} respectivamente.

Finalmente, ya que $\Delta t \ll 1$ podemos aproximar \mathbf{G} a $\mathbf{J}_{\mathbf{U}}$ y podemos obtener los autovalores de la matriz jacobiana como

$$\lambda(\mathbf{J}_{\mathbf{U}}) \simeq \frac{1}{\Delta t} \ln(\lambda(\mathbf{D}))$$

El paso de tiempo usado aquí es del mismo orden que el usado en la evolución temporal, o sea valores entre $10^{-5} < \Delta t < 10^{-4}$. Según se estudia en [Mamun and Tuckerman, 1995, Tuckerman and Barkley, 2000] como **método de potencia exponencial** integramos (2.38)

$$\delta \mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{D} \delta \mathbf{U}^n$$

con condiciones de fronteras homogéneas, por una largo período de tiempo de forma tal que la mayoría de autovectores decaigan rápidamente y solo queden los que correspondan a autovalores con mayor parte real. Si la matriz \mathbf{D} es diagonalizable y los valores absolutos de n autovalores dominantes cumplen

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq \dots \geq |\lambda_n|$$

entonces el método de potencia converge y convergerá mas rápido mientras más pequeño sea $\frac{|\lambda_2|}{|\lambda_1|}$ [Seydel, 2010].

El método de Arnoldi está basado en subespacios de Krylov y es seleccionado para resolver problemas de autovalores en matrices cuadradas no simétricas de grandes dimensiones, es fácilmente implementable y ha probado ser muy eficiente en la búsqueda de autovalores dominantes y sus correspondientes autovectores en distintos problemas de fluidos [Mercader et al., 2014, Meca et al., 2004, 2015] mediante los paquetes de rutinas ARPACK [Lehoucq et al., 1995].

2.6. Refinamiento de valores y vectores propios

Los autovalores y autovectores de la matrix jacobiana obtenidos mediante el método descrito anteriormente son sólo estimaciones de los valores exactos. Usaremos una iteración de Newton para mejorar dichos valores y acercarnos a los reales [Chenier et al., 1999, Xin and LeQuéré, 2001, 2002, Mamun and Tuckerman, 1995].

Iniciamos el procedimiento partiendo de los valores obtenidos para el autovalor dominante $\lambda = \sigma + i\omega$ y su correspondiente autovector $\mathbf{v} = \mathbf{v}_r + i\mathbf{v}_i$, los cuales satisfacen la relación

$$\mathbf{J}_U(\mathbf{v}_r + i\mathbf{v}_i) = (\sigma + i\omega)(\mathbf{v}_r + i\mathbf{v}_i)$$

Separando parte real e imaginaria tenemos el sistema

$$\mathbf{J}_U \mathbf{v}_r = \sigma \mathbf{v}_r - \omega \mathbf{v}_i \quad (2.39)$$

$$\mathbf{J}_U \mathbf{v}_i = \sigma \mathbf{v}_i + \omega \mathbf{v}_r \quad (2.40)$$

Haremos la iteración de Newton con el mismo preconditionamiento que anteriormente

$$\begin{bmatrix} \mathbf{P}(\mathbf{J}_U - \sigma) & \mathbf{P}\omega & -\mathbf{P}\mathbf{v}_r & \mathbf{P}\mathbf{v}_i \\ -\mathbf{P}\omega & \mathbf{P}(\mathbf{J}_U - \sigma) & -\mathbf{P}\mathbf{v}_i & -\mathbf{P}\mathbf{v}_r \\ \mathbf{e}_m^T & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{e}_m^T & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta \mathbf{v}_r \\ \delta \mathbf{v}_i \\ \delta \sigma \\ \delta \omega \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{P}(\mathbf{J}_U \mathbf{v}_r - \sigma \mathbf{v}_r + \omega \mathbf{v}_i) \\ \mathbf{P}(\mathbf{J}_U \mathbf{v}_i - \sigma \mathbf{v}_i + \omega \mathbf{v}_r) \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_r &\leftarrow \mathbf{v}_r - \delta \mathbf{v}_r \\ \mathbf{v}_i &\leftarrow \mathbf{v}_i - \delta \mathbf{v}_i \\ \sigma &\leftarrow \sigma - \delta \sigma \\ \omega &\leftarrow \omega - \delta \omega \end{aligned}$$

donde \mathbf{e}_m^T es la transpuesta del vector unitario que es nulo excepto el m -ésimo componente que es igual a la unidad. En la iteración de Newton los valores de σ y ω pueden cambiar. Para eliminar la indeterminación de la amplitud y fase del vector propio, fijamos la componente m -ésima de la parte real e imaginaria del vector propio \mathbf{v}_r y \mathbf{v}_i [Chenier et al., 1999]. Se debe tener cuidado en que ese valor no sea cero por alguna razón de simetría.

Capítulo 3

Convección natural en un cilindro horizontal

3.1. Introducción

La simulación numérica de la convección natural en cavidades con pequeño parámetro de forma tiene gran utilidad para entender la dinámica de fluidos en procesos de crecimiento de cristales y solidificación. Dentro de las técnicas de solidificación y crecimiento de cristales el método de Bridgman horizontal es una de las más simples [Garandet and T. Alboussière, 1999, Dost and Lent, 2007]. En este método se hace crecer muy lentamente un cristal dentro de un crisol conteniendo una mezcla líquida. Este envase puede tener diversas geometrías y está sometido a un gradiente térmico axial externo. Este gradiente térmico perpendicular a la aceleración gravitatoria provoca movimientos convectivos que conducen a oscilaciones de los valores de temperatura. Esto causa inhomogeneidades en el frente de solidificación, formación de dislocaciones cristalinas y otros posibles defectos en el cristal resultante. Se hace necesario entender los movimientos convectivos de la fase líquida en este proceso así como la estabilidad del flujo. En muchos casos prevenir la primera inestabilidad (primera transición del flujo) significaría estabilizar el proceso y minimizar la formación de defectos.

Se han dedicado muchos esfuerzos de investigación al estudio teórico de la estabilidad del flujo en fluidos de bajo número de Prandtl (Pr). El número de Prandtl de materiales semiconductores fundidos y metales líquidos caen en el rango de valores bajos $Pr \lesssim 10^{-2}$ debido a que son buenos conductores térmicos. Por ejemplo, el arseniuro de galio (GaAs) a 800°C tiene un valor de $Pr = \nu/\kappa = 0.004$ (ver Tabla 3.1). Dentro de los materiales con valores de Prandtl muy cercanos a cero el movimiento convectivo influye poco en la distribución de temperatura.

En cuanto a la modelización computacional de este fenómeno hay significativos avances hasta la fecha. Partiendo de la configuración más simple como es el caso de un canal bidimensional infinitamente largo y con un gradiente térmico horizontal aplicado a sus fronteras fijas ubicadas

Parámetros	Símbolo	Valor
Temperatura de crecimiento	T_g	800°C
Difusividad térmica	κ	$0.3 \text{ cm}^2/\text{s}$
Coefficiente de difusión solutal	D	$4 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$
Viscosidad Cinemática	ν	$1.21 \times 10^{-3} \text{ cm}^2/\text{s}$
Densidad de la solución	ρ	5.63 g/cm^3
Coefficiente de expansión térmica	α	$9.85 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$
Coefficiente de expansión solutal	β	-8.4×10^{-2}

TABLA 3.1: Propiedades físicas del compuesto $GaAs$ [Dost and Lent, 2007]

por encima y por debajo del fluido, el estado básico de esta configuración es el flujo de circulación de Hadley. En Hart [1972] se estudió numéricamente este flujo y se determinó los modos oscilatorios longitudinales de esta configuración con números de Prandtl bajos. Este problema ha sido estudiado en 2D [Laure and Roux, 1989, Sahai, 1999] y 3D [Lyubimova et al., 2009]. En la exhaustiva revisión realizada por Lappa [2007] se resume el estado del arte de la investigación sobre la circulación de Hadley en 2D y 3D y se muestran todos los posibles regímenes de flujos secundarios y oscilatorios en varios tipos de configuraciones, entre ellas el calentamiento lateral.

Otra configuración bidimensional modelada es el caso de un rectángulo con calentamiento en las fronteras verticales laterales. Gelfgat et al. [1999a,b] estudió un contenedor rectangular cuyo parámetro de forma fue variado entre 1 y 11, con números de Prandtl de $Pr = 0$ y $Pr = 0.015$ y con las paredes superior e inferior mantenidas en condiciones adiabáticas y no deslizantes en todo el contorno. En sus resultados se muestran los múltiples estados estacionarios con uno, dos, tres y cuatro rollos convectivos y sus correspondientes regiones de estabilidad. Los múltiples modos de perturbación dominantes se reemplazan unos a otros a medida que el parámetro de forma fue variado continuamente conduciendo a la aparición de diversos patrones de estados oscilatorios.

Para una caja rectangular 2D de parámetro de forma igual a 2 con una diferencia de temperatura entre las dos fronteras verticales y número de Prandtl de 0.00715 empleado en Mercader et al. [2005], el estado básico lo conforma un simple rollo convectivo con una simetría de reflexión con respecto al centro del dominio rectangular. Cuando se aumenta el número de Rayleigh este rollo se concentra en el centro de la cavidad inclinándose hacia la dirección diagonal. Esta solución básica pierde estabilidad en una bifurcación de Hopf supercrítica que mantiene la simetría y a mucho mayor número de Rayleigh ocurre una nueva bifurcación, esta vez de tipo Neimark-Sacker subcrítica, que rompe la simetría. La fuente de dichas inestabilidades es de naturaleza hidrodinámica.

En configuraciones 3D destacamos los trabajos realizados en cajas rectangulares. En Bucchignani and Mansutti [2000] se estudió la dinámica del fluido contenido una caja rectangular 3D con altura $y = 1$, ancho $z = 1$ y longitud $x = 4$ y con $Pr = 0.015$ (vector de gravedad paralelo a y). El mecanismo responsable de la transición al caos es un régimen quasiperiódico con tres frecuencias inconmesurables, lo cual es confirmado por experimentos físicos. Este trabajo también demostró la escasa aplicabilidad que tienen los trabajos numéricos bidimensionales de este problema, donde el régimen del flujo cambia de estacionario a periódico a cuasiperiódico a

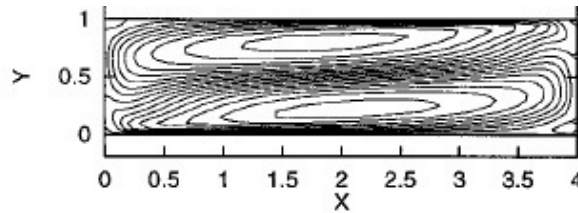


Figura 3.1: Líneas de isoamplitud de la velocidad en el plano longitudinal medio para $Ra = 1500$ y $Pr = 0.015$ para una caja rectangular 3D de altura $y = 1$, ancho $z = 1$ y longitud $x = 4$, calentada en el plano $x = 4$. Figura tomada de Bucchignani and Mansutti [2000]

estacionario de nuevo, mientras que en las simulaciones tridimensionales cambian de estacionario a periódico a quasiperiódico a caótico mediante la ruta Ruelle-Takens. En la Figura 3.1 se muestra las líneas de isoamplitud de la velocidad en el plano longitudinal medio para $Ra = 1500$ y $Pr = 0.015$ para una caja rectangular 3D calentada en el plano $x = 4$. Esta configuración es muy parecida a la que se obtiene en el plano longitudinal del cilindro horizontal. Otros trabajos realizados por Juel et al. [2001] y Hof et al. [2004] comparan resultados experimentales y numéricos hasta el umbral de la inestabilidad primaria en cajas rectangulares de dimensiones similares, con altura $z = 1$, ancho $y = 1$ y longitud $x = 4$ en el primer trabajo y con altura $z = 1$, ancho $y = 1.3$ y longitud $x = 5$ en el segundo. El umbral de inestabilidad oscilatoria tiene lugar a través de bifurcaciones de Hopf supercríticas, tanto en los resultados numéricos como experimentales, siendo muy próximos los valores críticos del número de Grashof y frecuencias aunque no coinciden en la secuencia de bifurcaciones. En las simulaciones numéricas en cajas por Henry and Ben Hadid [2007a] se estudian, en un amplio rango de valores del parámetro de forma y del número de Prandtl, los modos involucrados en la primera bifurcación del flujo según las simetrías del problema, donde se obtienen cuatro tipos de modos oscilatorios correspondientes a las cuatro posibles simetrías del sistema y los modos estacionarios.

Simulaciones en geometrías cilíndricas finitas han sido estudiadas escasamente hasta la fecha. Uno de los más recientes es el realizado por Vaux et al. [2006] en un cilindro horizontal, diferencialmente calentado en sus tapas, cuyo parámetro de forma fue variado desde 1.5 hasta 10 y con $Pr = 0.026$. El análisis de la energía de las fluctuaciones realizados por los autores nos permite comprender cuáles son los mecanismos de transición del flujo. El principal factor de inestabilidad es el efecto de cizalladura entre distintas capas del fluido en el plano longitudinal muy cercano al límite donde se encuentran las corrientes de fluidos que viajan en los dos sentidos.

Nuestro trabajo estará centrado en la identificación de las inestabilidades primarias del flujo básico de un cilindro horizontal y su caracterización según las simetrías y naturaleza en función de Pr y Γ .

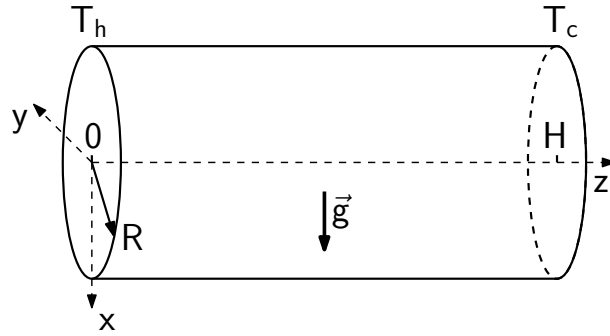


Figura 3.2: Configuración del cilindro horizontal con calentamiento lateral y la disposición de los ejes coordenados. El vector fuerza de gravedad es paralelo al eje x .

3.2. Objetivos del capítulo. Metodología.

En este capítulo estudiaremos la convección natural en un cilindro fijo sometido a un gradiente axial de temperatura. El eje del cilindro es perpendicular al vector aceleración de la gravedad $\mathbf{g} = g_x \hat{i}$ (ver Figura 3.2). El estudio comprende el análisis del flujo básico en función del parámetro de forma Γ , el número de Prandtl Pr y el número de Rayleigh Ra , hasta alcanzar la bifurcación primaria en función de dos de esos parámetros. El número de Prandtl estará en el rango típico de materiales semiconductores y metales fundidos ($Pr \leq 0.026$). El parámetro de forma Γ será mantenido en valores cercanos a 2, barriendo un rango entre 1.5 y 2.5.

En Sec. 2.1.1 ya expusimos las ecuaciones de Navier Stokes y de transporte de energía, así como las constantes y variables dependientes e independientes que nos permitirán modelar este problema, junto con las condiciones de contorno de la temperatura y la velocidad, dadas en Sec. 2.1.2 con $\Omega = 0$ y las simetrías del problema en Sec. 2.1.3.

En primer lugar, calcularemos el flujo básico y analizaremos su estabilidad lineal. Describiremos las propiedades de simetría tanto del flujo básico como de los flujos secundarios, así como el tipo de inestabilidad y el mecanismo físico correspondiente a la transición del flujo. El algoritmo antes expuesto en Sec. 2.3 y Sec. 2.5 es empleado para analizar la estabilidad de soluciones estacionarias y determinar el umbral de una inestabilidad, la cual puede mantener o no las simetrías espaciales del problema. Recordemos que la estabilidad de una solución es determinada por el signo de la parte real del primer autovalor del sistema de ecuaciones linealizadas. Para problemas con simetrías como es nuestro caso, existe un método alternativo, que también utilizamos para detectar la presencia de una bifurcación tanto estacionaria como oscilatoria y que pueden romper alguna de las simetrías del estado básico. Este método consiste en construir parámetros auxiliares que permiten detectar si las soluciones mantienen las simetrías. Como el problema en esta capítulo tiene tres diferentes simetrías R_1 , R_2 y R_3 (2.3) hemos construido sendos parámetros s_1 , s_2 y s_3 , los cuales son iguales a cero siempre que la simetría a la cual están asociados se mantenga. En caso contrario, comenzarán a crecer cuando surja una inestabilidad oscilatoria. La obtención

de las partes real (λ) e imaginaria (ω) del autovalor propio responsable de la inestabilidad oscilatoria la realizamos mediante ajustes a una función de la forma $\sim \sin(\omega t) \exp(\lambda t)$.

Posteriormente mostraremos y describiremos algunos flujos secundarios no lineales originados de las inestabilidades. Debido a la geometría finita confinada, es decir, por la presencia de paredes laterales y tapas, todos los flujos incluido los estados estacionarios básicos obtenidos son completamente tridimensionales.

Hemos usado un tamaño de malla de $N \times M \times K = 32 \times 52 \times 52$ en las direcciones radial, azimutal y axial para los cálculos con valores de Rayleigh de pequeño a moderado ($Ra < 7000$) y $N \times M \times K = 48 \times 64 \times 64$ para valores superiores. Con esta resolución se garantiza que los errores relativos en el número de Rayleigh y frecuencia en los puntos de bifurcación no superen el 0.1 % con respecto a resultados obtenidos con mallas de mayor resolución. El paso de tiempo de la integración temporal se situó en un rango decreciente en el intervalo $[5 \times 10^{-4}, 1 \times 10^{-5}]$ en función del incremento del número de Rayleigh.

3.3. Resultados

3.3.1. Estado básico

Definimos como estado básico de nuestro problema al estado estacionario obtenido para valores de Rayleigh pequeños que es invariante a todas las transformaciones de simetrías (ver Sec. 2.1.3). El estado con velocidad nula $\mathbf{u} = 0$ no es solución de nuestro problema con las condiciones de contornos impuestas, a diferencia del problema de convección de Rayleigh-Bénard. Las bifurcaciones del estado básico del problema estudiado en un dominio 2D rectangular pueden ser comparadas con los resultados del cilindro y en este capítulo haremos algunas comparaciones entre ambos resultados.

Para mostrar las soluciones del problema y comprobar el cumplimiento de las relaciones de simetrías representaremos el flujo transversal $u \hat{r} + v \hat{\theta}$ en tres secciones transversales situadas en $z = 0.05\Gamma$, $\Gamma/2$, 0.95Γ .

En la Figura 3.3 (arriba) mostramos el flujo transversal para $\Gamma = 2$, $Pr = 0.00715$ y $Ra = 1885$. La longitud de las flechas en cada figura no representan la misma escala. Mostraremos las soluciones también en el plano longitudinal L_v , el cual es el plano situado en $y = 0$ y el plano transversal situado en $x = 0$ que llamaremos L_h .

Para esta solución la velocidad máxima transversal en las secciones transversales $z = 0.05\Gamma$ y $z = 0.95\Gamma$ es aproximadamente cinco veces mayor que en la sección transversal central $z = \Gamma/2$. La componente azimutal v de la velocidad en el plano longitudinal L_v es cero debido a la simetría R_1 . En la Figura 3.3 (abajo) y la Figura 3.4 se muestran las isolíneas de la velocidad axial w y la desviación de la temperatura Θ en las mismas secciones transversales. El tono rojo (azul) más oscuro está relacionados con el valor más positivo (negativo). El color verde claro representa

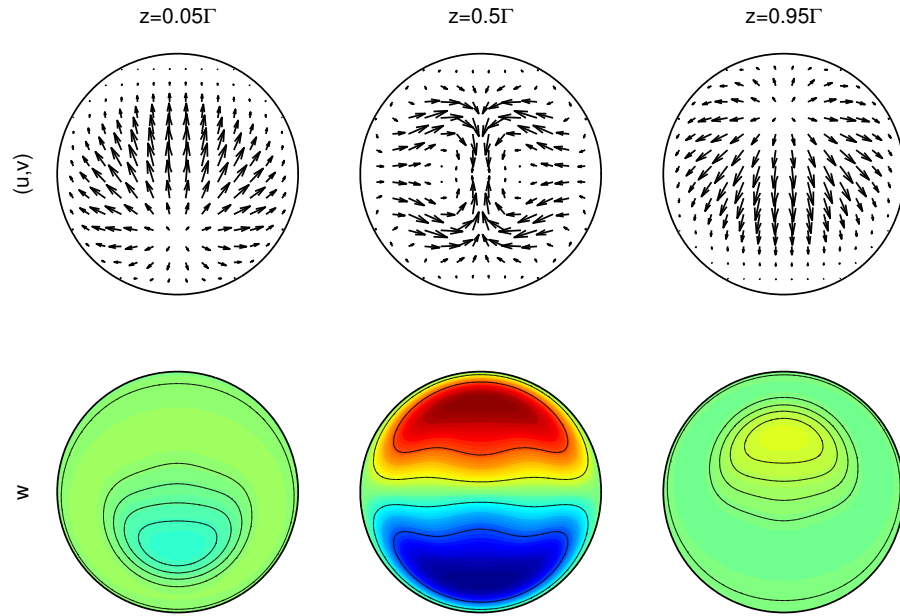
Flujo Básico $Pr=0.00715$ $Ra=1885$ $\Gamma=2$

Figura 3.3: Flujo transversal $u \hat{r} + v \hat{\theta}$ (arriba) e isolíneas de la velocidad axial w (abajo) en las secciones transversales en $z = 0.05\Gamma$, $z = \Gamma/2$ y $z = 0.95\Gamma$. La dirección positiva del eje z , perpendicular al papel apunta hacia dentro, ($Pr = 0.00715$, $Ra = 1885$, $\Gamma = 2$).

valores cercanos a cero. Las relaciones de simetría también imponen que tanto las componentes axial y azimutal de la velocidad (v, w) como la desviación de la temperatura Θ sean siempre cero en la línea horizontal situada en $(x, z) = (0, \Gamma/2)$. De acuerdo con la condición de contorno de la desviación de la temperatura Θ y w ambas deben ser casi nulas cerca de las tapas del cilindro.

Para la solución en la Figura 3.3 (abajo) la velocidad máxima (mínima) axial sin dimensiones es $|w| = 2.7$ y está localizada en la sección transversal situada en $z = 0.56\Gamma$ ($z = 0.44\Gamma$), en la posición radial $r = 0.71R$ y plano L_v . La velocidad transversal máxima (mínima) $|v_t| = 1.8$ está localizada en la sección transversal $z = 0.97\Gamma$ ($z = 0.03\Gamma$), $r = 0.17R$ y plano L_v .

En la sección transversal $z = \Gamma/2$ aparecen cuatro vórtices cercanos al diámetro horizontal. En esta línea el fluido circula radialmente desde la pared hacia los puntos de estancamiento, los cuales están localizados cerca del centro de la sección transversal ($r \approx 0.26R$). La velocidad radial máxima en esta línea horizontal es $u \approx -0.17$ y ocurre en $r \approx 0.71R$. En el diámetro vertical, el fluido circula desde la pared al centro, contrario a lo que pasa en el canal cilíndrico con contorno perfectamente conductor sujeto a un gradiente longitudinal de temperatura estudiado en Lyubimov et al. [2010].

En la Figura 3.5 (arriba a la izquierda) mostramos el plano vertical L_v ; los vectores de velocidad muestran el conocido rollo de circulación donde el fluido asciende por la pared caliente y desciende por la fría moviéndose longitudinalmente entre una y otra, creando en el centro un gradiente térmico verticalmente estable (ver Figura 3.4). Aquí la simetría R_1 fuerza a la componente

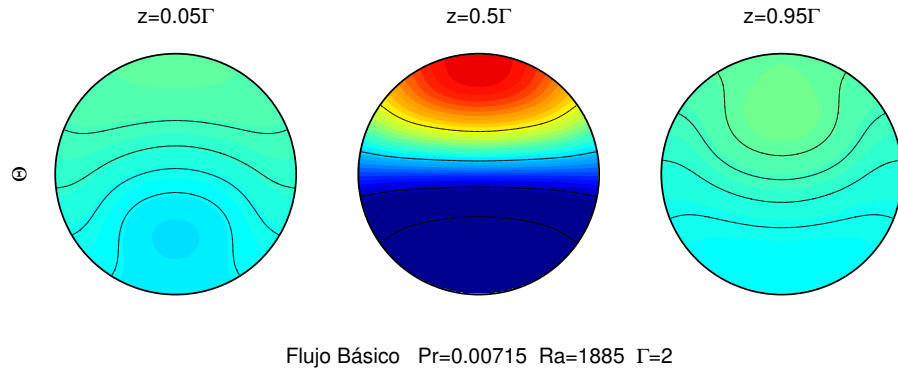


Figura 3.4: Isolíneas de la desviación de la temperatura en las secciones transversales situadas en $z = 0.05\Gamma$, $z = \Gamma/2$ y $z = 0.95\Gamma$ ($Pr = 0.00715$, $Ra = 1885$, $\Gamma = 2$).

azimutal v a ser igual a cero. Mostramos en la Figura 3.5 (arriba a la derecha) la proyección del campo de velocidad en el plano horizontal $x = 0$ (plano L_h) donde se identifican claramente cuatro vórtices. Nótese que la velocidad axial w del flujo cercano al eje del cilindro es positivo para $z > \Gamma/2$ y negativo $z < \Gamma/2$. El valor máximo de la proyección de la velocidad en el plano L_v es $v_l = 2.7$ y el valor máximo en la proyección de la velocidad en el plano horizontal L_h es $v_h = 1.15$ (las longitudes de las flechas en ambas figuras no están escaladas igual).

En la Figura 3.5 (abajo a la izquierda) se muestran las isolíneas de la desviación de la temperatura en el plano L_v . En esta se muestra que la temperatura del flujo es más caliente que el perfil lineal en la parte superior y más frío en la parte inferior, creando un gradiente verticalmente estable. En ese plano Θ varía entre ± 0.074 .

En la Figura 3.5 (abajo a la derecha) se muestran las isolíneas de Θ que varían entre ± 0.018 pero con diferente escala de color rojo (azúl) para el más positivo (negativo). En el plano L_v las simetrías R_2 y R_3 actúan como simetrías de reflexión con respecto al centro del rectángulo. En el plano L_h la simetría R_3 (R_1) actúa como reflexión con respecto a la línea vertical (horizontal) a través del centro del rectángulo y la R_2 es una reflexión con respecto al centro del rectángulo.

Analizaremos a continuación la bifurcación primaria del flujo para valores pequeños del número de Prandtl y con un parámetro de forma cercano a 2. El objetivo es caracterizar el flujo básico en el punto cercano a la bifurcación, el tipo de bifurcación y el flujo secundario cercano a los puntos críticos. Los valores del número de Prandtl considerados en este capítulo serán mantenidos por debajo de 0.026. Este valor fue usado en el trabajo de Vaux et al. [2006] y, como ya hemos dicho, corresponde a un valor típico de metales líquidos a altas temperaturas.

3.3.2. Estabilidad lineal para $Pr = 0.00715$ y $\Gamma \in [1.5, 2.5]$

En esta sección estudiamos la estabilidad del estado básico para un fluido con $Pr = 0.00715$ y parámetro de forma Γ en el rango de valores de $1.5 \leq \Gamma \leq 2.5$. Compararemos con los resultados

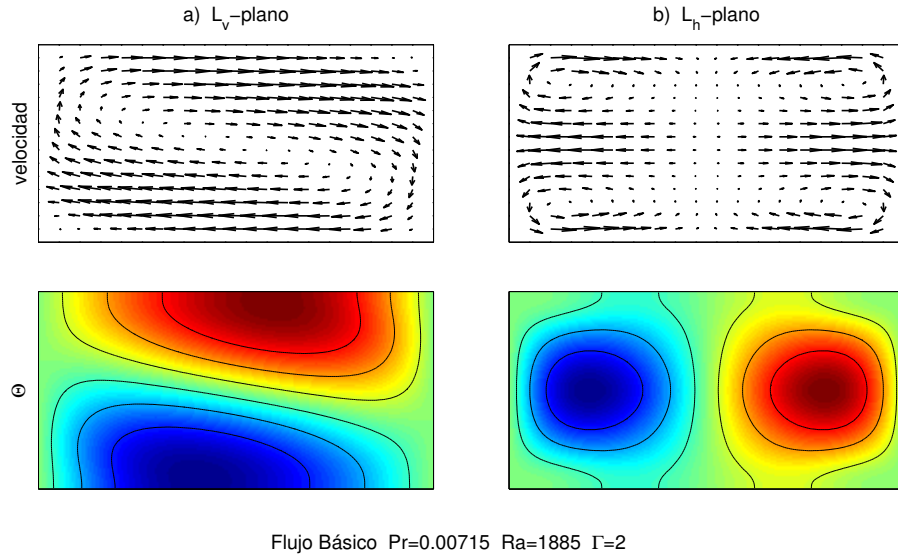


Figura 3.5: (a) Campo de velocidad (arriba) e isolíneas de la desviación de la temperatura (abajo) en el plano longitudinal L_v con el eje y positivo perpendicular al papel apuntando hacia dentro. (b) Proyección del campo de velocidad e isolíneas de la desviación de la temperatura en el plano horizontal L_h , con el eje x positivo perpendicular al papel apuntando hacia dentro ($Pr = 0.00715$, $Ra = 1885$, $\Gamma = 2$).

ya publicados en Mercader et al. [2005] para una caja rectangular 2D con igual valor de Pr . Describiremos la estructura del flujo básico y las propiedades de estabilidad en el intervalo.

La solución básica del rectángulo 2D es invariante a la simetría R_c , la cual es una reflexión con respecto al centro. Esta solución pierde su estabilidad en una bifurcación de Hopf supercrítica que mantiene la simetría R_c . En el cilindro la primera inestabilidad es oscilatoria, supercrítica y mantiene solo R_3 . En el plano L_v del cilindro, la transformación R_3 actúa sobre las componentes rectangulares de la velocidad en el plano v_x y v_z y sobre Θ de la misma forma como R_c lo hace en el dominio rectangular. Sin embargo, debido a que R_1 no es mantenida el autovector es antisimétrico con respecto a esta simetría [Bergeon and Knobloch, 2002], forzando a las componentes del autovector en ese plano v_x y v_z y Θ a ser cero. Para estos parámetros la primera inestabilidad en el cilindro es diferente de la del rectángulo. Para recuperar el mismo comportamiento sería necesario que la R_1 fuera también mantenida. Solo inestabilidades que mantienen todas las simetrías G son equivalentes a la inestabilidad R_c simétrica del rectángulo.

Los números de Rayleigh crítico y las correspondientes frecuencias son mostradas en la Figura 3.6. Observamos que estas curvas presentan una dependencia con el parámetro de forma similar al caso del rectángulo. Los valores críticos de Ra y ω son comparables. Por ejemplo para el rectángulo tenemos el par $(Ra_c, \omega_c) = (2381, 6.04)$ mientras que para el cilindro $(Ra_c, \omega_c) = (1885, 2.69)$.

En el caso del rectángulo, más allá de la bifurcación primaria supercrítica, existen soluciones periódicas simétricas hasta que ocurre una bifurcación de Neimark-Sacker en $Ra_2 \approx 26200$. Esta solución quasiperiódica secundaria también tiene la simetría de reflexión. La bifurcación

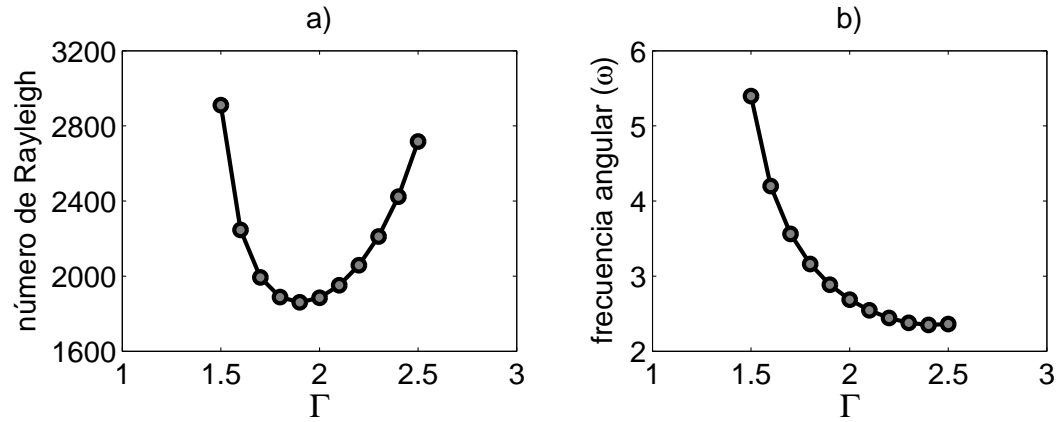


Figura 3.6: a) Número de Rayleigh crítico y b) frecuencia de la bifurcación primaria del flujo básico en función del parámetro de forma Γ para el número de Prandtl $Pr = 0.00715$.

secundaria en el cilindro ocurre en un valor $Ra_2 \approx 3100$ mucho más bajo que en el rectángulo y la inestabilidad secundaria es una bifurcación Pitchfork supercrítica que rompe la única simetría que permanece R_3 , lo cual da lugar a una solución periódica no simétrica síncrona. Por lo tanto, aunque los vectores de la velocidad en plano medio longitudinal del cilindro y en el rectángulo presenten un rollo de convección muy similar, los dos problemas no coinciden.

3.3.3. Estabilidad lineal para $\Gamma = 2$ y $Pr \in [0, 0.0249]$

En esta sección presentamos los resultados correspondientes a la estabilidad lineal del flujo básico para $\Gamma = 2$ y Pr variando desde 0 hasta 0.0249. En la región tres tipos de inestabilidades llegan a ser dominantes y serán descritas en las próximas secciones.

Las inestabilidades del estado estacionario básico pueden ser estacionarias u oscilatorias y pueden preservar una o todas las simetrías ya que siempre se romperán dos simetrías. El autovector correspondiente al autovalor dominante es antisimétrico con respecto a las simetrías rotas [Henry and Ben Hadid, 2007a]. Las bifurcaciones estacionarias que mantienen todas las simetrías, conocidas como bifurcaciones de nodo *saddle*, también son posibles. En la Tabla 3.2 resumimos las características de dichas inestabilidades, las cuales describiremos en las próximas tres secciones.

Rango Pr	simetría(s) preservada(s)	simetrías rotas	comportamiento temporal
$[0, 0.0132]$	R_3	R_1, R_2	oscilatoria
$[0.0132, 0.0149]$	R_1, R_2, R_3		oscilatoria
$[0.0149, 0.0249]$	R_1	R_2, R_3	estacionaria

TABLA 3.2: Simetrías mantenidas y rotas y comportamiento temporal de la inestabilidad que tiene lugar según el rango de número de Prandtl.

- Estabilidad lineal para $Pr \in [0, 0.0132]$.

La Figura 3.7 se muestra la dependencia del número de Rayleigh crítico en los valores de Pr . Las correspondientes frecuencias son mostradas en la Figura 3.7.

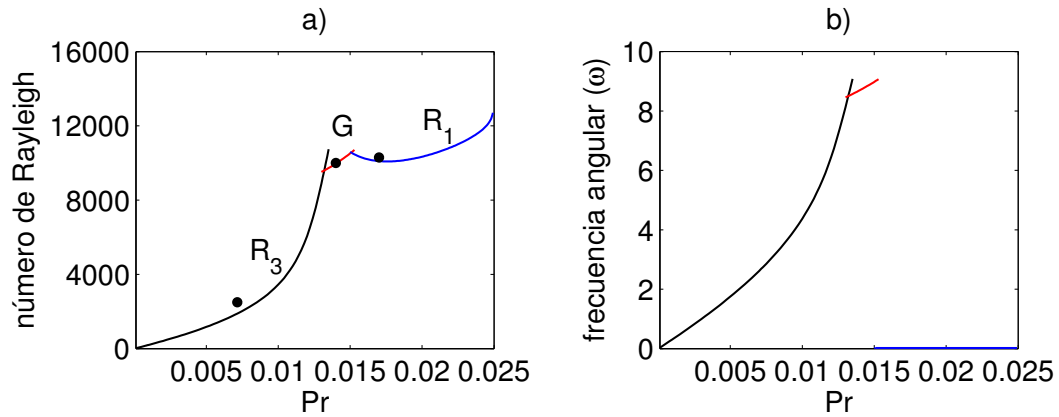


Figura 3.7: a) Número de Rayleigh crítico y b) frecuencia para la bifurcación primaria del estado básico. R_3 (R_1) es entendido como que en esa región la bifurcación mantiene la simetría de reflexión R_3 (R_1) del estado básico; G si todas las simetrías del flujo básico son mantenidas ($\Gamma = 2$). Los círculos rellenos en a) indican los puntos donde los flujos secundarios han sido calculados y serán mostrados en la Sec. 3.3.6

De los datos que nos aporta esta curva crítica tenemos que, por ejemplo, para un material como el arseniuro de galio referido en la introducción (Tabla 3.1) cuyo número de Prandtl es $Pr = 0.004$ el valor de Rayleigh crítico es de $Ra = 894.6$. Si tomamos una zona líquida de longitud axial $H = 1 \text{ cm}$ la diferencia térmica crítica entre las dos fronteras es de $\approx 27^\circ\text{C}$ a partir de la cual el flujo cambiará de estacionario a oscilatorio.

En la Figura 3.7 observamos un punto cercano a $Pr = 0.0132$ de doble bifurcación de Hopf, donde las dos inestabilidades oscilatorias bifurcan (una mantiene R_3 y la otra mantiene todas las simetrías) los dos modos inestables tienen casi la misma frecuencia. Este punto es cercano a ser resonante.

Para $Pr \leq 0.0132$ la inestabilidad es oscilatoria, mantiene la simetría R_3 del flujo básico y rompe R_1 y R_2 . En la Figura 3.8 (izquierda) mostramos las isolíneas de las partes real e imaginaria del autovector dominante de Θ para $Ra = 1885$ y $Pr = 0.00715$ en dos secciones transversales situadas en $z = \Gamma/4$ y $z = 3\Gamma/4$ desde la pared caliente del cilindro. En estas figuras el eje x esta dirigido hacia abajo y el eje positivo de z , el cual es perpendicular al papel, apunta hacia dentro. Esta selección será mantenida en todas las figuras en las cuales secciones transversales de autovectores sean ilustradas.

La desviación de la temperatura satisface

$$\begin{aligned}
 \Theta(r, \theta, z) &= -\Theta(r, -\theta, z) & \text{i.e.} & & R_1\Theta &= -\Theta \\
 \Theta(r, \theta, \Gamma/4) &= +\Theta(r, \theta + \pi, 3\Gamma/4) & \text{i.e.} & & R_2\Theta &= -\Theta \\
 \Theta(r, \theta, \Gamma/4) &= -\Theta(r, \pi - \theta, 3\Gamma/4) & \text{i.e.} & & R_3\Theta &= +\Theta
 \end{aligned}$$

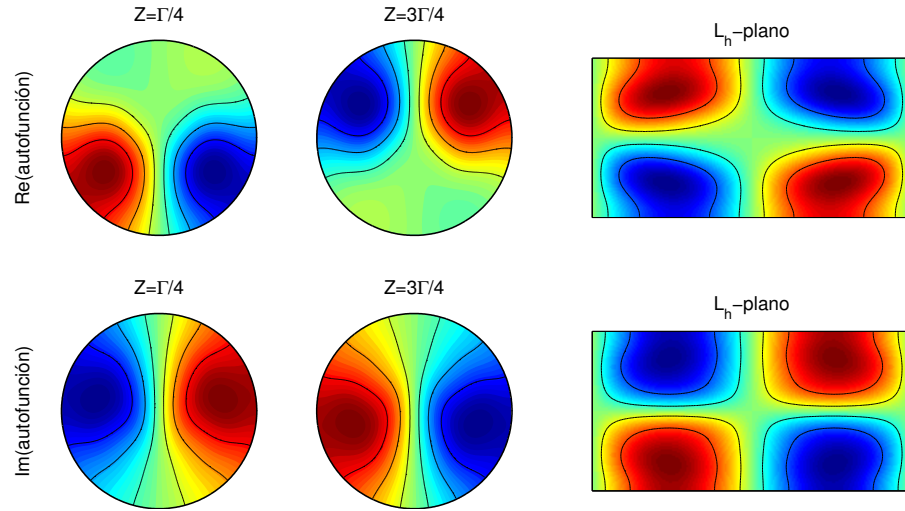


Figura 3.8: Autovalor responsable de la inestabilidad en el punto crítico $Pr = 0.00715$, $Ra = 1885$. La inestabilidad es oscilatoria, preserva la simetría R_3 del flujo básico y rompe las simetrías R_1 y R_2 . Las partes real e imaginaria de la desviación de la temperatura: (izquierda) en dos secciones transversales en las posiciones $z = \Gamma/4$ y $z = 3\Gamma/4$ desde la tapa caliente (el eje x positivo está dirigido hacia abajo) (derecha) en el plano L_h (el eje x positivo es perpendicular al papel y dirigido hacia adentro). Los colores para las secciones transversales y los planos tienen diferentes escalas. ($\Gamma = 2$).

En la Figura 3.8 (derecha) mostramos las isolíneas de las partes real e imaginaria del autovector dominante de Θ en el plano L_h . Observamos la naturaleza antisimétrica del campo con respecto a R_1 y R_2 . La escala de colores asociada es diferente a las secciones transversales en el plano horizontal, donde siempre el rojo (azul) representa el más positivo (negativo). Para este modo crítico, $\Theta = 0$ en el plano L_v .

- Estabilidad lineal para $Pr \approx 0$

Para valores del número de Prandtl menores que $Pr = 10^{-4}$ hemos adimensionalizado las ecuaciones de Sec. 2.1 con el tiempo viscoso

$$\hat{t} = \frac{\hat{L}^2}{\nu}$$

Con esta nueva expresión para el tiempo hemos obtenido el sistema de ecuaciones sin dimensiones siguientes utilizado para el cálculo con $Pr \approx 0$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (3.1a)$$

$$\partial_t \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla P + \nabla^2 \mathbf{u} + Gr \left(\frac{z}{\Gamma} - \Theta \right) \hat{\mathbf{x}}, \quad (3.1b)$$

$$\partial_t T + (\mathbf{u} \cdot \nabla) T = \frac{1}{Pr} \nabla^2 T, \quad (3.1c)$$

donde $Gr = \frac{Ra}{Pr}$ es el llamado número de Grashof.

La inestabilidad dominante es la que hemos descrito hasta ahora (ver Tabla 3.2 en el rango $[0, 0.0132]$). Los valores críticos satisfacen $Ra_c/Pr \approx 197.4 \times 10^3$ y $\omega_c/Pr \approx 314.4$ y están en concordancia con los que hemos obtenido para el caso límite $Pr = 0$. Este resultado difiere del obtenido para una sección transversal cuadrada en Lyubimova et al. [2009]. Los autores obtienen una inestabilidad dominante estacionaria que mantiene la simetría respecto al plano vertical R_1 . También tenemos diferencias con el resultado en Henry and Ben Hadid [2007b] en una cavidad rectangular 3D. En la cavidad de longitud $x = 4$, altura $z = 1$ y ancho $y = 2$ se obtiene una inestabilidad oscilatoria que mantiene la simetría equivalente a R_2 . Estas discrepancias son esperadas debido a que nos referimos a diferentes geometrías, lo cual demuestra que el aspecto geométrico es relevante.

- Estabilidad lineal para $Pr \in [0.0132, 0.0149]$

En la Figura 3.9 está representada esta inestabilidad que es oscilatoria y preserva todas las simetrías. A la izquierda tenemos las partes real e imaginaria del autovector de Θ en dos secciones transversales situadas a una distancia $\Gamma/4$ y $3\Gamma/4$ desde la frontera caliente, en los valores críticos $Ra_c = 9967$ y la frecuencia de Hopf $\omega_c = 8.7$, para $Pr = 0.014$. La desviación de la temperatura satisface ahora

$$\begin{aligned} \Theta(r, \theta, z) &= \Theta(r, -\theta, z) & \text{i.e.} & & R_1\Theta &= +\Theta \\ \Theta(r, \theta, \Gamma/4) &= -\Theta(r, \theta + \pi, 3\Gamma/4) & \text{i.e.} & & R_2\Theta &= +\Theta \\ \Theta(r, \theta, \Gamma/4) &= -\Theta(r, \pi - \theta, 3\Gamma/4) & \text{i.e.} & & R_3\Theta &= +\Theta \end{aligned}$$

Mostramos en la Figura 3.9 (derecha) las isolíneas de Θ en el plano L_v que ahora no es cero. Si multiplicamos el autovector complejo por una fase apropiada y representamos Θ y \mathbf{u} en el plano L_v obtenemos una estructura muy similar al modo dominante obtenido en $Pr = 0.00715$ en el rectángulo 2D.

- Estabilidad lineal para $Pr \in [0.0149, 0.0249]$

Aquí en esta región la inestabilidad es estacionaria y preserva R_1 . El modo dominante crítico es siempre el mismo (las transiciones no pueden ser inferidas a partir de discontinuidades en la frecuencia)

Para mostrar las propiedades de simetría del autovector mostramos en la Figura 3.10 (izquierda) las isolíneas de la parte real de Θ para $Ra = 10.05 \times 10^3$ y $Pr = 0.017$ en las dos mismas secciones transversales como en las figuras anteriores.

Es fácil notar que Θ ahora obedece

$$\begin{aligned} \Theta(r, \theta, z) &= \Theta(r, -\theta, z) & \text{i.e.} & & R_1\Theta &= +\Theta \\ \Theta(r, \theta, \Gamma/4) &= +\Theta(r, \theta + \pi, 3\Gamma/4) & \text{i.e.} & & R_2\Theta &= -\Theta \\ \Theta(r, \theta, \Gamma/4) &= +\Theta(r, \pi - \theta, 3\Gamma/4) & \text{i.e.} & & R_3\Theta &= -\Theta \end{aligned}$$

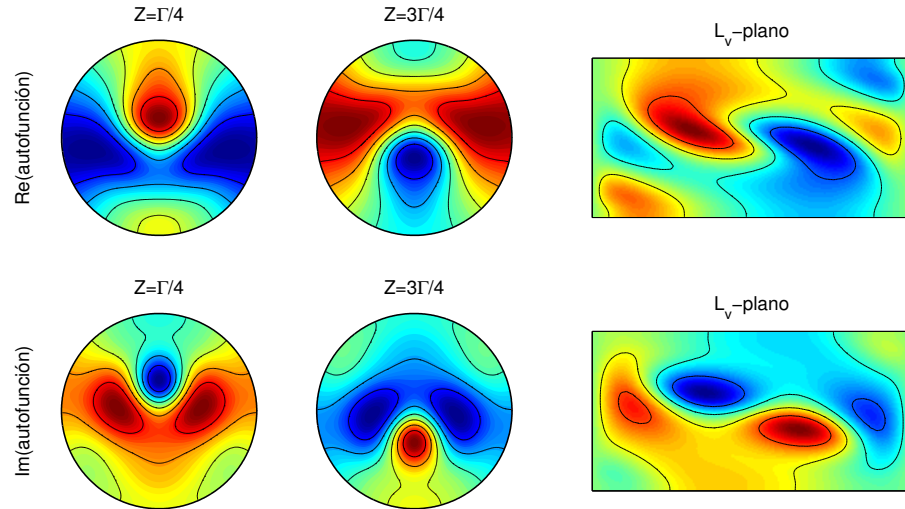


Figura 3.9: Autovalor responsable de la inestabilidad en el punto crítico $Pr = 0.014$, $Ra = 9967$. La inestabilidad es oscilatoria, preserva todas las simetrías del estado básico. Las partes real e imaginaria de la desviación de la temperatura: (izquierda) en dos secciones transversales en las posiciones $z = \Gamma/4$ y $z = 3\Gamma/4$ desde la tapa caliente, (derecha) en el plano L_v (el eje y positivo es perpendicular al papel y dirigido hacia adentro). Los colores para las secciones transversales y los planos tienen diferentes escalas. ($\Gamma = 2$).

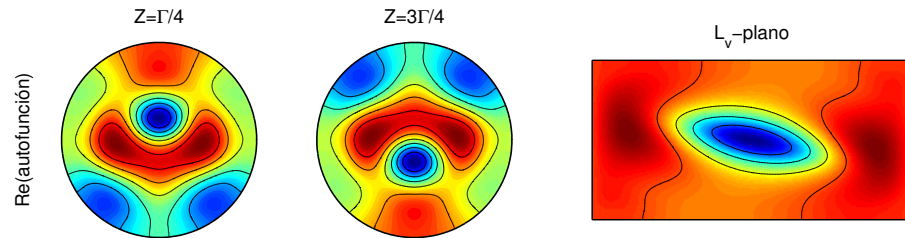


Figura 3.10: Autovalor responsable de la inestabilidad en el punto crítico $Pr = 0.017$, $Ra = 10.05 \times 10^3$. La inestabilidad es estacionaria, preserva la simetría R_1 del flujo básico y rompe las simetrías R_2 y R_3 . Parte real de la desviación de la temperatura: (izquierda) en dos secciones transversales en las posiciones $z = \Gamma/4$ y $z = 3\Gamma/4$ desde la tapa caliente, (derecha) en el plano L_v (el eje y positivo es perpendicular al papel y dirigido hacia adentro). Los colores para las secciones transversales y los planos tienen diferentes escalas. ($\Gamma = 2$).

En la Figura 3.10 (derecha) mostramos Θ en el plano L_v . Podemos apreciar el carácter anti-simétrico con respecto a R_2 . Los planos L_h y L_v para Θ son muy similares debido al hecho de que el modo crítico tiene una contribución axisimétrica como se mostrará posteriormente.

3.3.4. Análisis de la energía cinética de la perturbación

Para analizar el mecanismo físico de estos tres tipos de inestabilidades calculamos la transferencia de energía cinética en algunos puntos críticos [Ma et al., 2005, Henry and Ben Hadid, 2007b, Vaux et al., 2006]. Usamos la ecuación de Reynolds-Orr que se obtiene integrando el producto interno de la ecuación de momentum para la perturbación y la perturbación de la velocidad

(autovectores críticos) en todo el volumen ocupado por el fluido. Denotamos por $\{\mathbf{U}_0, T\}$ a las variables del estado básico y $\{\mathbf{u}', \Theta'\}$ el autovector. La energía cinética de la perturbación es definida como $K = 1/2 \int_{\Sigma} \mathbf{u}' \cdot \mathbf{u}'^* d\Sigma$ y satisface

$$\frac{\partial K}{\partial t} = -\text{Re} \left(\int_{\Sigma} \mathbf{u}'^* \cdot (\mathbf{u}' \cdot \nabla \mathbf{U}_0) d\Sigma \right) - \text{Re} \left(Pr \int_{\Sigma} (\nabla \times \mathbf{u}') \cdot (\nabla \times \mathbf{u}'^*) d\Sigma \right) - \text{Re} \left(Ra Pr \int_{\Sigma} \mathbf{u}'^* \cdot \Theta' \hat{\mathbf{i}} d\Sigma \right)$$

donde el símbolo $*$ significa complejo conjugado y $\text{Re}(\cdot)$ es parte real de \cdot .

El primer término a la derecha representa la producción de energía por la cizalladura entre las capas de fluido, el segundo es la disipación viscosa (la cual siempre es negativa) y el tercero es la producción de energía por la flotación debido al efecto térmico. El término con signo positivo (negativo) desestabiliza (estabiliza) el flujo.

A partir de que el término a la izquierda es cero en el punto crítico, los términos de cizalladura y de flotación tienen que ser balanceados por el término de disipación viscosa.

$$\text{Re} \left(\int_{\Sigma} \mathbf{u}'^* \cdot (\mathbf{u}' \cdot \nabla \mathbf{U}_0) d\Sigma \right) + \text{Re} \left(Ra Pr \int_{\Sigma} \mathbf{u}'^* \cdot \Theta' \hat{\mathbf{i}} d\Sigma \right) = -\text{Re} \left(Pr \int_{\Sigma} (\nabla \times \mathbf{u}') \cdot (\nabla \times \mathbf{u}'^*) d\Sigma \right)$$

Si normalizamos toda la ecuación, dividiendo por el término de la disipación viscosa

$$F_{vis} = -\text{Re} \left(Pr \int_{\Sigma} (\nabla \times \mathbf{u}') \cdot (\nabla \times \mathbf{u}'^*) d\Sigma \right)$$

la suma del de cizalladura y flotación tienen que ser igual a 1.

$$\frac{1}{F_{vis}} [\text{Re} \left(\int_{\Sigma} \mathbf{u}'^* \cdot (\mathbf{u}' \cdot \nabla \mathbf{U}_0) d\Sigma \right) + \text{Re} \left(Ra Pr \int_{\Sigma} \mathbf{u}'^* \cdot \Theta' \hat{\mathbf{i}} d\Sigma \right)] = 1$$

En la Tabla 3.3 mostramos Ra y Pr en diferentes puntos críticos, la simetría que se mantiene y el valor del término de cizalladura normalizado. La producción de energía cinética de la perturbación claramente viene del término de cizalladura (el valor de este término normalizado es mayor que la unidad). El término de flotación es siempre negativo (estabilizador) de acuerdo con el gradiente térmico verticalmente estable del flujo básico. No hay diferencias importantes entre los valores normalizados del término de cizalladura en el rango de números de Prandtl analizados a pesar de los diferentes tipos de simetrías preservadas y valores del Rayleigh. Sin embargo, las contribuciones de cada término a la cizalladura fluctúan.

En la Tabla 3.3 hemos indicado las principales partes desestabilizadoras de la expansión del término de cizalladura en cada caso. Observamos que, excepto en la inestabilidad que mantiene la simetría R_2 (descrita posteriormente), el valor medio del término desestabilizador $w'^* u' \frac{\partial W_0}{\partial r}$

y $w'^* \frac{v'}{r} \frac{\partial W_0}{\partial \theta}$ tienen el mismo orden de magnitud. El valor máximo de estos términos desestabilizadores están siempre localizados cerca del centro del cilindro, lejos de las fronteras. Esto indica que las inestabilidades son originadas en la masa del fluido y no en las capas límites en las paredes del contenedor. Las contribuciones con más poder estabilizador en los puntos críticos donde las simetrías G y R_1 son preservadas es el término $w'^* w' \frac{\partial W_0}{\partial z}$.

Simetría	número de Rayleigh ($\times 10^3$)	número de Prandtl	Cizalladura normalizada	término de Cizalladura
R_3	1.885	0.00715	1.027	$w'^* \frac{v'}{r} \frac{\partial W_0}{\partial \theta}$
R_3	3.450	0.01	1.041	$w'^* \frac{v'}{r} \frac{\partial W_0}{\partial \theta}$
R_3	8.888	0.013	1.045	$w'^* \frac{v'}{r} \frac{\partial W_0}{\partial \theta}$
G	9.967	0.014	1.029	$w'^* u' \frac{\partial W_0}{\partial r}$
R_1	10.05	0.017	1.031	$w'^* u' \frac{\partial W_0}{\partial r}$
R_1	12.67	0.02492	1.022	$w'^* \frac{v'}{r} \frac{\partial W_0}{\partial \theta}$
R_2	13.01	0.02492	1.024	$w'^* \frac{v'}{r} \frac{\partial W_0}{\partial \theta}$
R_2	13.96	0.026	1.023	$w'^* \frac{v'}{r} \frac{\partial W_0}{\partial \theta}$

TABLA 3.3: Simetría preservada, número de Rayleigh Ra , número de Prandtl Pr , producción normalizada de energía cinética por el término de cizalladura asociada al autovector en los puntos de bifurcación y el término principal desestabilizador de la expansión de cizalladura en cada caso. ($\Gamma = 2$).

3.3.5. Descomposición de las autofunciones en modos de Fourier

Para obtener más información sobre la estructura azimutal de las autofunciones, hemos evaluado la contribución de los distintos modos de Fourier azimutales a la energía cinética media \bar{E} . Usaremos la energía cinética media \bar{E} como una medida de la fuerza de la convección:

$$\bar{E} = \frac{2}{\pi\Gamma} \int_0^{2\pi} \int_0^\Gamma \int_0^{1/2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \, r \, dr \, dz \, d\theta \quad (3.2)$$

De la expansión de Fourier en la coordenada azimutal, es fácil dividir la energía cinética media usando la identidad de Parseval de la forma siguiente

$$\bar{E} = E_0 + \sum_{m=1}^M E_m$$

siendo

$$E_0 = \frac{\int_0^{1/2} \int_0^\Gamma (|\hat{u}_0|^2 + |\hat{v}_0|^2 + |\hat{w}_0|^2) \, r \, dr \, dz}{(\Gamma/4)}, \quad E_m = \frac{2 \int_0^{1/2} \int_0^\Gamma (|\hat{u}_m|^2 + |\hat{v}_m|^2 + |\hat{w}_m|^2) \, r \, dr \, dz}{(\Gamma/4)},$$

donde $|\hat{\phi}_m|$ se refiere al m -ésimo componente de Fourier complejo de la función ϕ . Algunos resultados de este análisis son mostrados en la Figura 3.11, donde está representado una gráfica de barras para el flujo básico y para las partes real e imaginaria del autovector en los puntos de bifurcación que hemos usado previamente para cada tipo de inestabilidad. La escala de amplitud

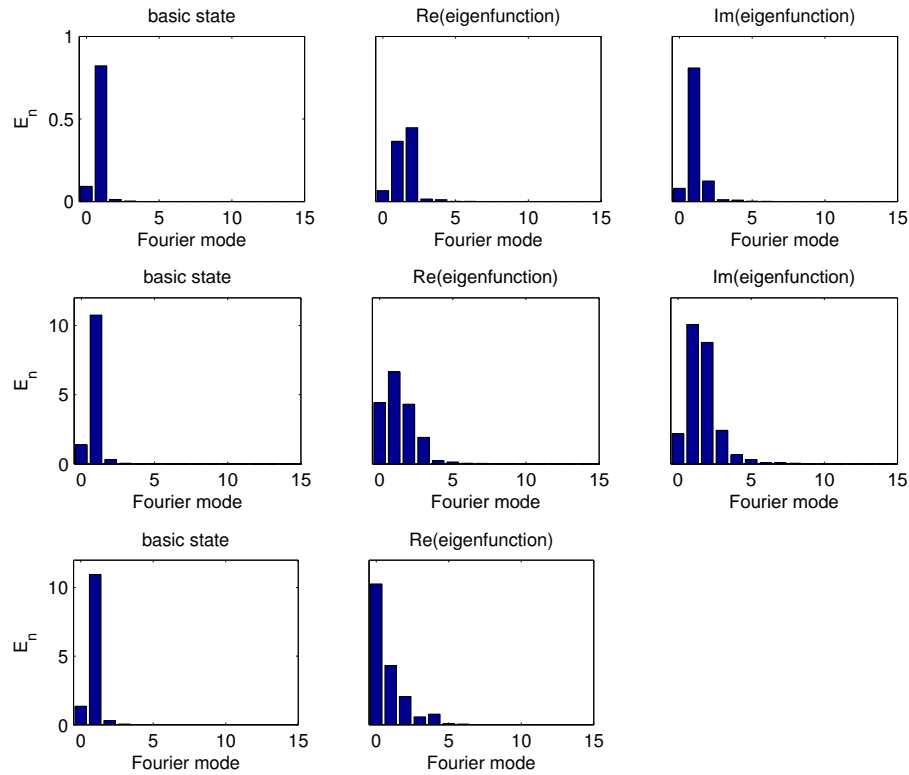


Figura 3.11: Gráfica de barras mostrando la contribución azimuthal E_m del modo crítico a la energía cinética media para el flujo básico y para las partes real e imaginaria de los modos críticos en los puntos de bifurcación. Desde arriba hacia abajo ($Ra = 1885$, $Pr = 0.00715$); ($Ra = 9967$, $Pr = 0.014$); ($Ra = 10.05 \times 10^3$, $Pr = 0.017$) autovector real.

es solo especificada en el flujo básico. La escala (no definida) para las partes real e imaginaria de cada modo crítico es la misma.

Podemos inferir de este gráfico que la estructura modal del flujo básico es muy similar en los tres casos. Está dominada por el modo $m = 1$ y tiene una pequeña contribución del modo $m = 0$, solo que las amplitudes lucen diferentes. La inestabilidad crítica que preserva la simetría R_3 ($Ra = 1885$, $Pr = 0.00715$) es dominada por el modo $m = 1$, pero incorpora una pequeña contribución del $m = 2$. En el modo crítico que mantiene todas las simetrías ($Ra = 9967$, $Pr = 0.014$), los modos azimutales $m = 1$ y $m = 2$ son los dominantes e incorpora una contribución significativa de los modos $m = 0$ y $m = 3$. Finalmente, el modo crítico real que mantiene R_1 ($Ra = 10.05 \times 10^3$, $Pr = 0.017$) es dominado por el modo $m = 0$, con significativas contribuciones de los modos $m = 1, 2, 4, 3$ ordenados por su intensidad.

- Resultados para $\Gamma = 2$ y $Pr = [0.02492 - 0.026]$.

Para describir el escenario de bifurcaciones para $0.02492 \leq Pr \leq 0.026$ mostramos en la Figura 3.12 el valor de E_0 (contribución del modo cero azimuthal al valor medio de la energía cinética) de las soluciones estacionarias con las simetrías G en función del número de Rayleigh para diferentes valores del número de Prandtl. Para $Pr = 0.02492$ (Figura 3.12(a)) se han obtenido dos curvas de soluciones (negra y roja). La curva negra a la izquierda (prácticamente una línea recta)

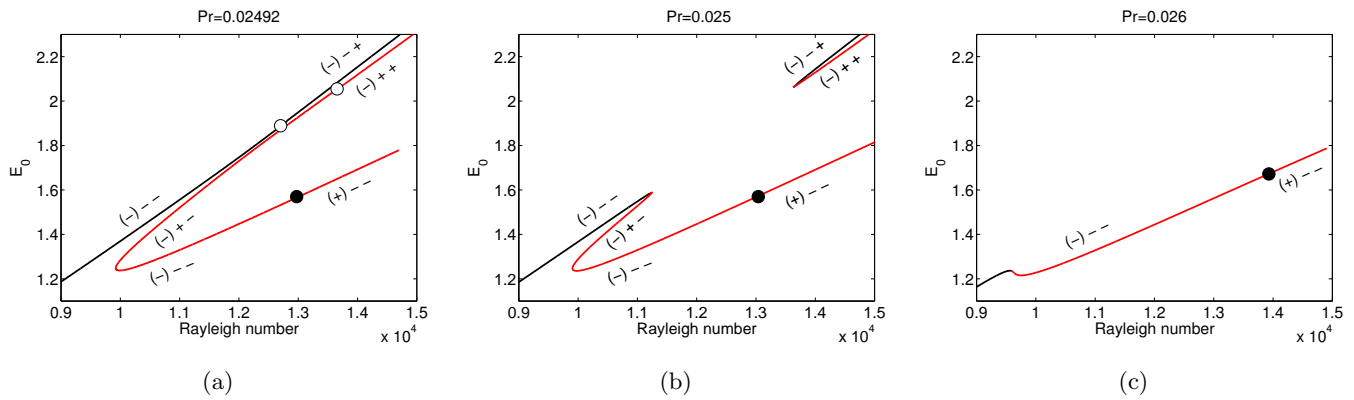


Figura 3.12: Diagrama de bifurcaciones mostrando el valor de E_0 (contribución del modo cero azimutal al valor medio de la energía cinética) de las soluciones estacionarias que son simétricas G en función del número de Rayleigh para diferentes valores del Prandtl (a) $Pr = 0.02492$, (b) $Pr = 0.025$, (c) $Pr = 0.026$. Los círculos vacíos representan bifurcaciones estacionarias que mantienen la simetría R_1 y los círculos rellenos representan bifurcaciones oscilatorias que solo mantiene la simetría R_2 . El signo de la parte real de los autovalores dominantes es incluido; el paréntesis significa que es un autovalor complejo. ($\Gamma = 2$).

se extiende a valores más bajos del Rayleigh y corresponden al flujo básico previamente descrito. Las soluciones de esta curva son estables hasta el valor $Ra = 12.79 \times 10^3$ (círculo vacío), donde una inestabilidad estacionaria que mantiene R_1 aparece. Las soluciones de la rama superior de la segunda curva (roja), las de la zona que se extiende hacia los valores superiores del Rayleigh, son inestables con dos autovalores reales positivos, uno correspondiente a un autovector que mantiene todas las simetrías G y el otro solo R_1 .

Se realizó la continuación numérica de la curvas negra y la rama superior de la curva roja hasta valores $Ra = 21.0 \times 10^3$ y aún se mantenían separadas. Decreciendo el valor del número de Rayleigh en la rama superior de la curva roja tiene lugar una bifurcación que mantiene R_1 en $Ra = 13.66 \times 10^3$ (círculo vacío). Para valores más bajos del número de Rayleigh, las soluciones de la rama superior de la curva roja permanecen aún inestables pero con solo un autovalor positivo real, correspondiente a un autovector que preserva la simetría G .

En el nodo *saddle* $Ra = 9923$, las soluciones de la rama superior de la curva roja ganan estabilidad. Cuando el número de Rayleigh crece por la rama inferior de la curva roja una nueva bifurcación, ahora de naturaleza oscilatoria ($\omega = 21.0$) y que mantiene la simetría R_2 , tiene lugar en $Ra = 13.01 \times 10^3$ (círculo relleno en la Figura 3.12). A partir de este punto, las soluciones de la rama inferior de la curva roja son inestables. ((3.2)) Para ayudar al lector, hemos incluido en la Figura 3.12 el signo de las partes reales de los autovalores dominantes, donde el paréntesis indica que el autovalor complejo mantiene R_2 . Como vemos hay una región en la cual coexisten dos soluciones estables preservando todas las simetrías. Ambas soluciones lucen muy similares y no es fácil distinguir una de la otra. En la Figura 3.13 mostramos las proyecciones del campo de velocidad en las secciones transversales $z = \Gamma/2$ y en el plano L_h de las dos soluciones estables

G -simétricas estacionarias $Pr = 0.02492$ en los puntos de bifurcación $Ra = 12.79 \times 10^3$ (curva negra, línea recta) y $Ra = 13.01 \times 10^3$ (rama inferior de la curva roja).

El flujo en la Figura 3.13(a) es del mismo tipo que el flujo básico descrito en previas secciones (Figura 3.3 y Figura 3.4), aunque ahora ya ha experimentado algunas transformaciones. Por ejemplo, los cuatro vórtices cercanos a la línea horizontal paralela al eje y en la sección transversal en $z = \Gamma/2$, han llegado a ser más potentes y se han alejado de esta línea, los puntos de estancamientos se han desplazado del centro y la velocidad radial en esta línea comparada a los valores de la proyección de la velocidad en la misma sección se han debilitado. La velocidad transversal máxima en esta sección $v_t = 2.6$ está en el diámetro vertical. En el plano horizontal L_h los cuatro vórtices en las esquinas se han debilitado y el valor máximo de la proyección de la velocidad en este plano es $v_h = 6.8$.

La solución en la nueva rama (Figura 3.13(b)) se caracteriza por tener, en la sección transversal $z = \Gamma/2$ una velocidad radial más fuerte cercana a la línea horizontal paralela al eje y dirigido desde el centro hacia la pared lateral. La máxima velocidad transversal $v_t = 2.7$ está ahora en la línea horizontal. En el plano L_h , observamos que en el eje del cilindro aparece dos puntos de estancamiento. El flujo fluye desde estos puntos hacia las tapas y hacia el centro. El valor máximo de la proyección de la velocidad en el plano horizontal es $v_h = 5.5$, un valor inferior a pesar de que el número de Rayleigh es superior.

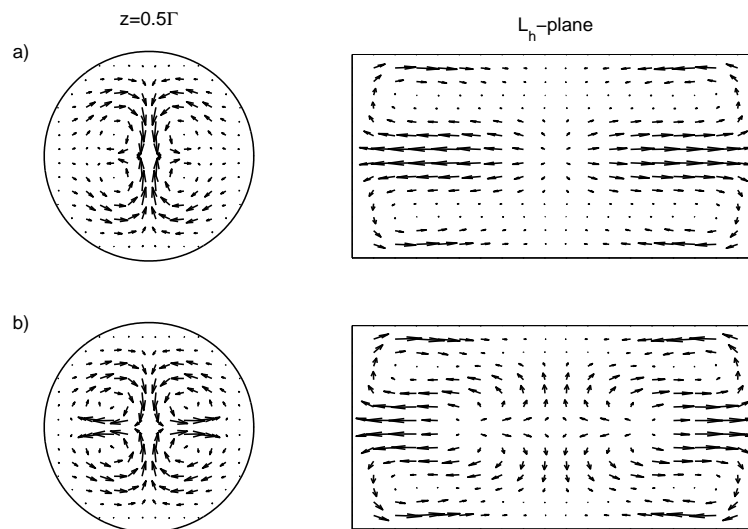


Figura 3.13: Campo de velocidad transversal en la sección transversal vertical en $z = \Gamma/2$ y la proyección del campo de velocidad en el plano horizontal L_h para las soluciones básicas estacionarias G -simétricas en los puntos críticos a) $Ra = 12.67 \times 10^3$ y b) $Ra = 13.01 \times 10^3$ (ver texto). $Pr = 0.02492$, $\Gamma = 2$.

En la Figura 3.12(b) vemos cómo ha evolucionado el diagrama previo de bifurcación de $Pr = 0.02492$ a $Pr = 0.025$. Las ramas cuyas inestabilidades mantienen R_1 (círculos vacíos) se conectan en una bifurcación *branching* o transcítica de codimensión 2, dando lugar a dos nuevos puntos de nodo *saddle* al aumentar el número de Prandtl. Las dos bifurcaciones que mantienen R_1 deben situarse en una misma rama (fold-Pitchfork) y luego anularse. La curva superior

desconectada se desplaza hacia valores más altos del número de Rayleigh cuando el número de Prandtl se incrementa. Para $Pr = 0.025$ el nodo *saddle* de la curva desconectada superior es cercano a $Ra = 13.63 \times 10^3$ y para $Pr = 0.02525$ está en las cercanías de $Ra = 17.22 \times 10^3$.

Las soluciones de la curva desconectada inferior en la zona que se extiende a valores más bajos del Rayleigh son estables hasta que se alcanza el nodo *saddle* en $Ra = 11.25 \times 10^3$ (de hecho, hay tres nodos *saddle* muy cercanos). El tramo de curva entre los nodos *saddle* situados en $Ra = 9905$ y $Ra = 11.25 \times 10^3$ es inestable.

La parte real del autovalor asociado a la inestabilidad estacionaria que mantiene R_1 es siempre negativa; aunque esta comienza a aproximarse a cero, justo antes de la localización del nodo *saddle* en $Ra = 11.25 \times 10^3$ esta alcanza su valor máximo y pasa a ser de nuevo más negativa. A partir del nodo *saddle* en $Ra = 9905$ la solución es estable. Incrementando el número de Rayleigh hay una bifurcación en $Ra = 13.01 \times 10^3$, la cual es oscilatoria y mantiene la simetría R_2 , como en el caso de $Pr = 0.02492$. De nuevo, hay una región donde coexisten dos soluciones estables que preservan todas las simetrías.

Para $Pr = 0.026$ esta región de biestabilidad deja de existir (ver Figura 3.12(c)) y las soluciones son estables hasta $Ra = 13.96 \times 10^3$, donde comienza la inestabilidad oscilatoria que mantiene R_2 . Los puntos de nodos *saddle* situados en $Ra = 9905$ y $Ra = 11.25 \times 10^3$ en la Figura 3.12(b) se irán acercando a medida que aumentamos el número de Prandtl, hasta que se encuentren en un punto. Este punto se denomina punto de cúspide. Por eso, una bifurcación tipo *cúspide* de codimensión 2 tiene lugar entre $Pr = 0.025$ y $Pr = 0.026$. La rama superior desconectada está fuera de la escala.

Para describir la inestabilidad en $Ra = 13.96 \times 10^3$ y $Pr = 0.026$, mostramos en la Figura 3.14(izquierda) las partes real e imaginaria de Θ del autovector dominante en dos secciones transversales en las posiciones $z = \Gamma/4, 3\Gamma/4$ desde la tapa caliente. La desviación de la temperatura satisface

$$\Theta(r, \theta, z) = -\Theta(r, -\theta, z) \quad \text{i.e.} \quad R_1 \Theta = -\Theta \quad (3.3)$$

$$\Theta(r, \theta, \Gamma/4) = -\Theta(r, \theta + \pi, 3\Gamma/4) \quad \text{i.e.} \quad R_2 \Theta = +\Theta \quad (3.4)$$

$$\Theta(r, \theta, \Gamma/4) = +\Theta(r, \pi - \theta, 3\Gamma/4) \quad \text{i.e.} \quad R_3 \Theta = -\Theta \quad (3.5)$$

La naturaleza antisimétrica con respecto a las transformaciones R_1 y R_3 pueden ser apreciadas en la Figura 3.14(derecha) donde mostramos Θ en el plano horizontal ($\theta = \pi/2, -\pi/2$). Como consecuencia de la simetría rota R_1 , la desviación de la temperatura es nula en el plano vertical L_v . La producción de energía cinética en esta bifurcación viene también del término de cizalladura (ver Tabla 3.3). La estructura modal de las autofunciones está ahora dominada por los modos azimutales $m = 1$ y $m = 2$ e incorpora contribuciones significativas de los modos $m = 3$ y $m = 0$ (ver Figura 3.15).

En la Tabla 3.4 resumimos los resultados de simetrías rotas y mantenidas y comportamiento temporal de las inestabilidades halladas en el rango de número de Prandtl estudiados.

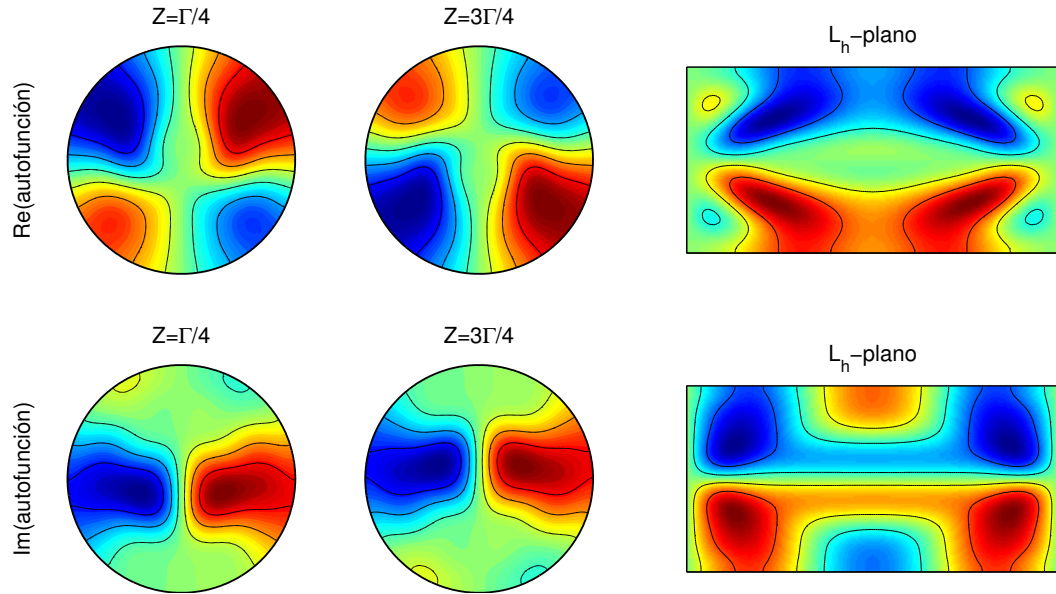


Figura 3.14: Autovectores responsables de la inestabilidad en el punto crítico $Pr = 0.026$, $Ra = 13.96 \times 10^3$. La inestabilidad es oscilatoria, preserva la simetría R_2 del flujo básico y rompe R_1 y R_3 . Las partes real e imaginaria de Θ : (izquierda) en dos secciones transversales en las posiciones $z = \Gamma/4, 3\Gamma/4$ desde la tapa caliente, (derecha) en el plano horizontal L_h (el eje positivo de las x , perpendicular al papel, apunta hacia dentro). Escala de colores para las secciones transversales y las gráficas de planos tienen diferentes escalas. ($\Gamma = 2$).

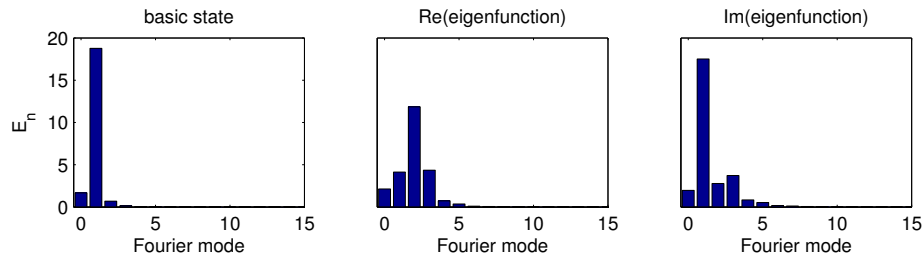


Figura 3.15: Gráfica de barras de las contribuciones modales E_m a la energía cinética media del flujo básico y para las partes real e imaginarias del modo crítico en el punto de bifurcación. $Ra = 13.96 \times 10^3$, $Pr = 0.026$, $\Gamma = 2$.

Rango Pr	simetría(s) preservada(s)	simetrías rotas	comportamiento temporal
$[0 - 0.0132]$	R_3	R_1, R_2	oscilatoria
$[0.0132 - 0.0149]$	R_1, R_2, R_3	-	oscilatoria
$[0.0149 - 0.0249]$	R_1	R_2, R_3	estacionaria
$[0.02492]$	R_1	R_2, R_3	estacionaria
	R_1	R_2, R_3	estacionaria
	R_2	R_1, R_3	oscilatoria
$[0.025]$ $[0.026]$	R_2	R_1, R_3	oscilatoria
	R_2	R_1, R_3	oscilatoria

TABLA 3.4: Simetrías mantenidas y rotas y comportamiento temporal de la inestabilidad según el rango de número de Prandtl.

3.3.6. Flujos secundarios

En las secciones previas (Sec. 3.3.2 y Sec. 3.3.3) hemos analizado en detalle la estabilidad del flujo básico y hemos identificado cuatro tipos diferentes de inestabilidades en el rango del número de Prandtl considerado. Aquí describiremos los estados saturados que se alcanzan una vez que se cruza el umbral de la inestabilidad para algunos valores seleccionados del número de Prandtl, uno para cada modo de inestabilidad identificado mostrado en la Figura 3.7.

En los cuatro casos, las bifurcaciones son supercríticas. El procedimiento que hemos seguido consiste en tomar un valor del Rayleigh ligeramente superior al umbral de inestabilidad. Se integran numéricamente las ecuaciones dependientes del tiempo hasta que se alcanza un flujo secundario saturado. Se toma como condición inicial una solución de flujo básico estable por debajo del inicio de inestabilidad.

En adelante describiremos las soluciones saturadas en los cuatro casos.

- Flujo oscilatorio con las simetrías R_1 y R_2 rotas ($Pr = 0.00715$, $Ra = 2500$)

Para este valor de Pr , la primera inestabilidad del flujo básico es oscilatoria. Este es el caso analizado en la Figura 3.3.2, donde el flujo básico ha sido descrito en detalles (Figura 3.3,3.4). El inicio de la inestabilidad es a través de una bifurcación de Hopf que ocurre en $Ra_c = 1885$. El flujo muestra una simetría espacio-temporal tal que la acción espacial de R_1 y R_2 es compensada exactamente por una evolución temporal de medio período.

La Figura 3.16 representa este flujo para un valor supercrítico del número de Rayleigh ($Ra = 25$) en dos secciones transversales en $z = \Gamma/4$ y $z = 3\Gamma/4$. Esta es una forma conveniente de captar las simetrías del flujo explicadas previamente. Aquí presentamos ocho instantáneas de Θ en intervalos de tiempo equiespaciados en un período ($T = 2.17$). De esta figura podemos apreciar que las isolíneas de la temperatura se acercan y se alejan de la línea horizontal de la sección transversal periódicamente y observamos que las simetrías R_1 y R_2 se mantienen si comparamos dos secciones transversales separadas $T/2$.

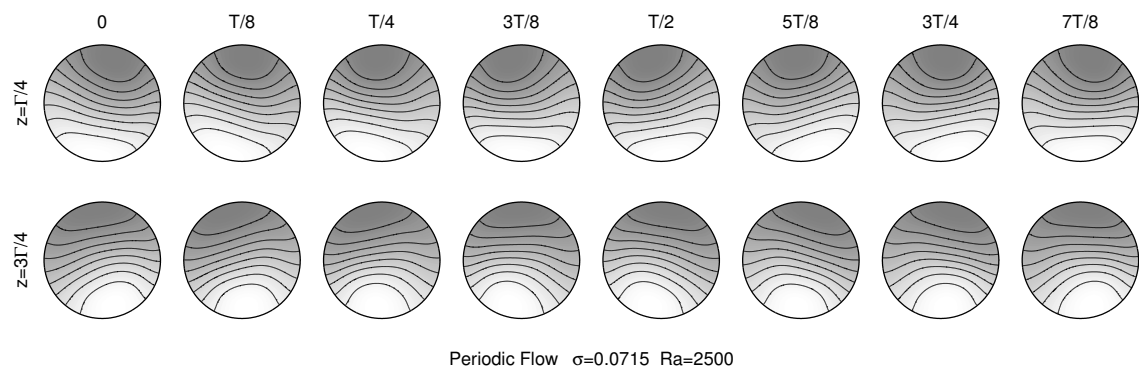


Figura 3.16: Instantáneas en intervalos de tiempo equiespaciados que cubren el período completo en dos secciones transversales $z = \Gamma/4$ y $z = 3\Gamma/4$. Las isolíneas representan la desviación de la temperatura para $Ra = 2500$, $Pr = \sigma = 0.00715$, $\Gamma = 2$.

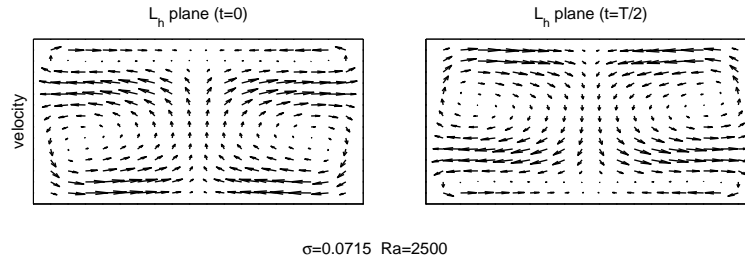


Figura 3.17: Proyección de la velocidad en el plano horizontal L_h en dos instantes separados por un intervalo de tiempo de medio período. $Ra = 2500$, $Pr = \sigma = 0.00715$, $\Gamma = 2$.

En la Figura 3.17 representamos la proyección del campo de velocidad en el plano L_h en dos instantes de tiempos diferentes separados medio de período. Podemos observar que el flujo consiste en cuatro vórtices; en cada vórtice el fluido cerca de las paredes va hacia el centro de la sección transversal del cilindro y cerca del eje va hacia las tapas del cilindro, como en el flujo básico. La diferencia en el flujo entre dos instantes del flujo mostrado es que los vórtices llegan a ser más anchos y estrechos periódicamente en cada mitad del dominio. Como consecuencia de la simetría R_3 de la solución, esta proyección tiene una simetría de reflexión con respecto a la línea central vertical del plano rectangular L_h , como puede ser visto en la figura.

- Flujo oscilatorio simétrico ($Pr = 0.014$, $Ra = 10.0 \times 10^3$).

En este caso la bifurcación es oscilatoria y preserva todas las simetrías espaciales, cuya autofunción ha sido mostrada en (Figura 3.9). Hemos calculado la solución saturada cerca del inicio de la inestabilidad ($Ra_c = 9967$) y hemos encontrado que es una bifurcación supercrítica. En esta región el espacio de parámetros tiene tres modos cruzando muy cerca (ver Figura 3.7).

En la Figura 3.18 se muestra la perturbación del campo de temperatura (hemos substraído el promedio temporal del campo de temperatura) para una solución saturada en $Ra = 10.0 \times 10^3$, la cual tiene un período de $T = 0.72$. La figura representa ocho instantáneas en intervalos de tiempo equiespaciados, del campo de temperatura en dos diferentes secciones transversales en $z = \Gamma/4$ (figuras de arriba) y $z = 3\Gamma/4$ (figuras de abajo).

Se aprecian todas las simetrías en cualquier instante de tiempo. Dos instantáneas separadas un cuarto de período casan con las partes real e imaginaria de la autofunción en la Figura 3.9.

- Flujo estacionario con las simetrías R_2 y R_3 rotas ($Pr = 0.017$, $Ra = 10.3 \times 10^3$).

Hemos calculado el flujo estacionario para $Pr = 0.017$ y $Ra = 10.3 \times 10^3$, ligeramente por encima del punto crítico ($Ra_c = 10.05 \times 10^3$). En la Figura 3.19 se muestran las líneas de la proyección de la velocidad y las isolíneas de Θ en los planos L_v y L_h . En el plano L_v , las simetrías rotas R_2 y R_3 son difíciles de ver. Sin embargo en el plano L_h , notamos claramente que la simetría de reflexión con respecto al centro del cilindro está rota (como consecuencia de la simetría rota R_2) y lo mismo ocurre para la reflexión en la línea central vertical del plano (como consecuencia de la simetría rota R_3). El flujo mantiene R_1 , como es visto en la figura, que es la simetría de reflexión a través de la línea central horizontal de este plano (Figura 3.19).

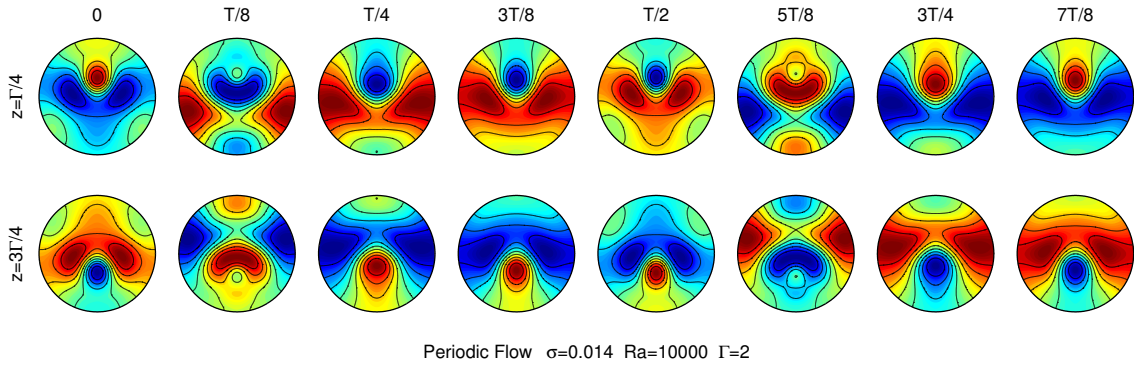


Figura 3.18: Instantáneas de la perturbación de la temperatura (hemos substraído el promedio temporal del campo de temperatura) en intervalos de tiempo equiespaciados en un período completo. Arriba corresponde a la sección transversal en $z = \Gamma/4$ y abajo en $z = 3\Gamma/4$ para $Ra = 10.0 \times 10^3$, $Pr = \sigma = 0.014$, $\Gamma = 2$.

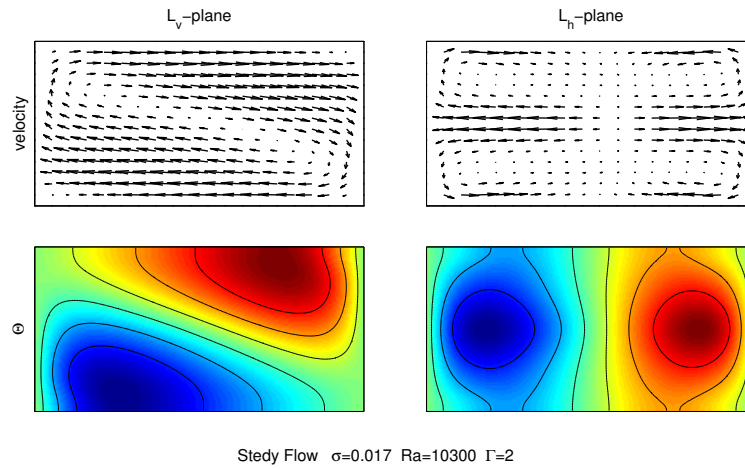


Figura 3.19: Proyección del campo de velocidades (arriba) y la desviación de la temperatura (abajo) en el plano vertical L_v , con el eje y positivo, perpendicular al papel, apuntando hacia dentro (planos de la izquierda), y en el plano horizontal L_h con el eje x positivo, perpendicular al papel, apuntando hacia dentro (planos de la derecha). $Ra = 10.3 \times 10^3$, $Pr = \sigma = 0.017$, $\Gamma = 2$.

- Flujo oscilatorio con simetrías R_1 y R_3 rotas ($Pr = 0.026$, $Ra = 14.5 \times 10^3$)

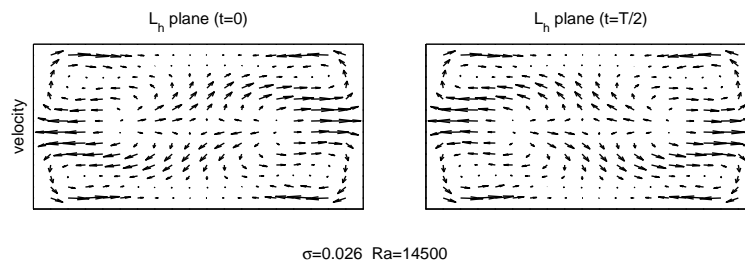


Figura 3.20: Proyección del campo de velocidad en el plano horizontal L_h en dos instantes separados por medio período. El eje x positivo es perpendicular al papel apuntando hacia adentro. $Ra = 14.5 \times 10^3$, $Pr = 0.026$, $\Gamma = 2$.

Para $Pr = 0.026$ la primera inestabilidad identificada cuando aumentamos el Rayleigh es oscilatoria y rompe R_1 y R_3 . Para este valor del número de Prandtl el estado básico pierde estabilidad en una bifurcación de Hopf supercrítica en un valor de $Ra = 14.0 \times 10^3$. Hemos obtenido una solución saturada oscilatoria para $Ra = 14.5 \times 10^3$ con un período $T = 0.28$. Figura 3.20 representa, para esta solución saturada, el campo de velocidad proyectado en el plano horizontal L_h en dos instantes de tiempo separados medio período. Se puede ver que el flujo cercano a la línea vertical del plano medio (con respecto a la figura) cambia de dirección cada medio período y que los vórtices localizados cerca de la esquina, ahora simétricos respecto al centro (mantiene simetría R_2), llegan a ser más anchos y más estrechos periódicamente. A partir de esta solución ha sido calculada muy cerca de la bifurcación la desviación del estado básico es muy pequeña. Sin embargo la reflexión rota con respecto a la línea central vertical y horizontal de los planos del rectángulo es claramente apreciada en la Figura 3.20 (consecuencia de las simetrías rotas R_3 y R_1).

3.4. Conclusiones

En este capítulo hemos expuesto los principales resultados sobre el estudio del flujo inducido en un cilindro horizontal cerrado con una diferencia de temperatura entre sus tapas [Mercader et al., 2014]. Ha estado centrado en caracterizar el flujo básico y determinar el umbral de la primera transición del flujo en función de los parámetros característicos del problema, como el parámetro de forma Γ entre 1.5 y 2.5 y el número de Prandtl desde $Pr \approx 0$ hasta $Pr = 0.026$. Este valor de Pr es característico de metales fundidos y compuestos semiconductores a altas temperaturas.

El sistema modela la zona líquida dentro de la cápsula horizontal en un experimento de crecimiento de cristales de Bridgman. El estado conductivo puro no es solución del sistema de ecuaciones y condiciones de contorno. Para cualquier valor del gradiente térmico impuesto, contenido dentro del valor del número de Rayleigh, siempre habrá movimiento del fluido sin importar cuán pequeño sea este gradiente. Dentro de la geometría cerrada, el flujo básico es tridimensional y posee todas las simetrías de las ecuaciones y condiciones de contorno aplicadas.

El principal objetivo dentro de este capítulo ha sido caracterizar todos los tipos de inestabilidades primarias del flujo básico cuando se incrementa el gradiente térmico entre las tapas en los extremos verticales.

Hemos calculado el flujo básico integrando las ecuaciones dependientes del tiempo hasta que el estado estacionario es establecido. También hemos calculado soluciones estacionarias usando el método de Newton-GMRES (ver Sec. 2.3). Se han empleado también el algoritmo de continuación para continuar ramas de soluciones (ver Sec. 2.4). Se han calculado los autovalores y autovectores a lo largo de las ramas de soluciones para determinar el umbral de la inestabilidad (ver Sec. 2.5). Los principales resultados están resumidos en la Figura 3.7, donde los valores críticos son mostrados para el rango completo de valores de Pr estudiados.

Hemos identificado cuatro regiones diferentes de inestabilidades en el rango completo de números de Prandtl estudiados ($0 \leq Pr \leq 0.026$). Dichas inestabilidades rompen diferentes simetrías y pueden ser estacionarias u oscilatorias. Hemos tratado de esclarecer si el mecanismo de la inestabilidad es dominado por las fuerzas de flotación o las de cizalladura. Del análisis de la energía cinética de la perturbación podemos concluir que no hay diferencias significativas en la contribución de cizalladura de los cuatro modos encontrados.

La contribución modal a la energía cinética media para cada autovector muestra algunas diferencias en su descomposición espectral; la bifurcación estacionaria es dominada por el modo $m = 0$ mientras que los modos oscilatorios tienen contribuciones significativas de los modos $m = 1$ y $m = 2$. En todos los casos el estado básico muestra el mismo espectro.

Hemos caracterizado la estructura de los flujos resultantes de estas inestabilidades con el objetivo de ganar en comprensión sobre los mecanismos físicos que conducen a ellos.

Para valores de Pr cercanos a cero un modo oscilatorio que mantiene $R3$ domina hasta valores de $Pr < 0.0132$ (ver Figura 3.7). Esto difiere del comportamiento estudiado en una geometría rectangular cerrada 3D (sección transversal 2×1 y longitud 4) por Henry and Ben Hadid [2007a], donde para valores de Pr muy pequeños $0 \leq Pr \approx 10^{-4}$ hay un cruce de un modo dominante oscilatorio el cual mantiene la simetría equivalente R_2 a un modo estacionario que mantiene la simetría equivalente R_1 la cual domina hasta $Pr \approx 0.015$. Esta diferencia entre resultados muestra que la geometría y el número de Prandtl tienen una influencia fundamental en las inestabilidades del flujo básico en problemas de calentamiento lateral.

Capítulo 4

Convección natural en un cilindro horizontal con rotación axial

4.1. Introducción

Como ya fue expuesto en la introducción del Cap. 3, la configuración de un cilindro horizontal calentado lateralmente simula de manera simplificada la región líquida en un experimento de crecimiento de cristales por el método de Bridgman horizontal. Una de las técnicas que se emplea en los experimentos de crecimiento de cristales para optimizar dicho proceso es la rotación del contenedor. Esto permite homogeneizar la temperatura en la muestra e incrementar la velocidad de crecimiento.

Hasta la fecha los trabajos numéricos dedicados al estudio y simulación tridimensional de un cilindro horizontal con rotación axial y gradiente térmico lateral han sido mas bien escasos, al contrario de la configuración vertical, a la cual se le ha prestado mayor atención. En el trabajo realizado por Fujiwara et al. [1998], en un cilindro con parámetro de forma $\Gamma = 1$ lleno de un fluido con $Pr = 0.73$ (vapor) se observa que la velocidad axial del flujo disminuye, con la consecuente supresión del transporte convectivo a medida que se incrementa la velocidad angular. En las isolíneas de la temperatura se observa la transformación de un campo dominado por la convección a uno dominado por la conducción. En el trabajo realizado por Zhao et al. [1998] en dos sistemas de referencias (inercial y no inercial) en el dominio 2D (sección transversal) de un cilindro sometido a rotación axial, todos los flujos en el sistema de referencia inercial (no rotatorio) son estacionarios en el rango de valores de Rayleigh estudiados. La caída del valor del número de Nusselt a valores de $Nusselt \approx 1$ para distintos valores del Rayleigh cuando aumenta la rotación significa que la transferencia de calor convectivo se produce principalmente por conducción. Recordemos que el número de Nusselt es la razón entre la transferencia de calor de una solución determinada a la transferencia de calor conductivo a través de una superficie determinada. Comportamientos similares en el valor del número de Nusselt y el transporte convectivo han sido encontrados en los resultados numéricos que mostraremos en este capítulo.

También el efecto de la rotación en la temperatura y en el campo de velocidades serán mostrados y descritos con más detalle.

4.2. Objetivos del capítulo

En este capítulo simularemos el dinámica del fluido en un cilindro horizontal con igual configuración en las condiciones de contorno térmicas estudiadas en el Cap. 3 (ver Sec. 2.1.2), es decir, con una diferencia de temperatura entre sus tapas laterales y condiciones de contorno adiabáticas en las paredes horizontales. Todo el dominio rota con velocidad constante adimensional Ω alrededor del eje del cilindro como se muestra en la Figura 4.1. Recordemos que este problema posee una única simetría de reflexión R_2 a través del centro del cilindro.

Describiremos los campos de velocidad y temperatura para valores bajos de Ω , analizando cuál efecto es el dominante en el flujo en cada caso, es decir, entre la convección natural producida por el gradiente térmico perpendicular al vector de gravedad g o la rotación del cilindro. El número de Prandtl ($Pr = 0.01$) y el parámetro de forma ($\Gamma = 2$) serán mantenidos constantes en todos los resultados que se mostrarán en el capítulo. Aunque los valores adimensionales de Ω estarán en el rango $[0, 8]$, nos centraremos en los resultados para el rango $[0, 4.5]$.

Mostraremos las característica del estado básico en función de la velocidad angular y haremos el análisis de estabilidad de dicho estado básico mostrando el diagrama de bifurcación en el espacio de parámetros (Ra, Ω) . Finalmente mostraremos y describiremos algunas soluciones secundarias del problema.

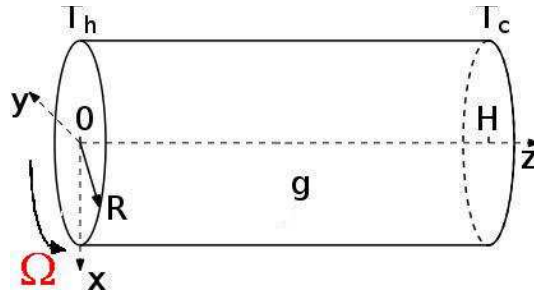


Figura 4.1: Disposición de los ejes coordenados cartesianos y dirección de rotación del cilindro horizontal calentado lateralmente, donde $T_h > T_c$ son las temperaturas en las tapas situadas en $z = 0$ y $z = H$. ($\vec{\Omega} = -\Omega \hat{z}$).

4.3. Resultados

4.3.1. Estado Básico

En la Figura 4.2 y la Figura 4.3 mostramos el estado básico obtenido para $Ra = 4500$ y velocidad angular $\Omega = 1.1$. Con el objetivo de hacer explícita la simetría R_2 de la solución, presentamos en la Figura 4.2 (arriba) el flujo de velocidad transversal y las isolíneas de la velocidad axial

(abajo) y en la Figura 4.3 las isolíneas de la desviación de la temperatura en tres secciones transversales a lo largo del eje z , uno en el centro $z = \Gamma/2$ y dos equidistantes a éste situadas en $z = 0.05\Gamma$, 0.95Γ . Para ganar en claridad en cada figura no hemos usado la misma escala para la longitud de las flechas. Para esta solución la velocidad transversal máxima en las secciones transversales en $z = 0.05\Gamma$ y $z = 0.95\Gamma$ es 3.52, aproximadamente 4 veces mayor que en el plano $z = \Gamma/2$ (0.87). Note que en estas secciones transversales, la velocidad transversal máxima es mayor que la velocidad azimutal en las paredes, $v = \Omega \frac{1}{2} = 0.55$. Recordar que el radio adimensional es $\frac{R}{L} = \frac{1}{2}$. Debido a la rotación de la pared, se rompe la invarianza de reflexión con respecto al plano vertical $y = 0$ del flujo básico comparado con el caso $\Omega = 0$ en [Mercader et al., 2014]. Observamos una inclinación en las isolíneas del campo de velocidad axial w y en la desviación de la temperatura Θ en la circulación longitudinal con respecto a este plano $y = 0$. En la Figura 4.4 se muestra el flujo de circulación longitudinal en el plano en el cual la velocidad axial tiene el máximo valor ($w = 5.13$) y la temperatura T modulada por la advección de las corrientes de convección en el mismo plano

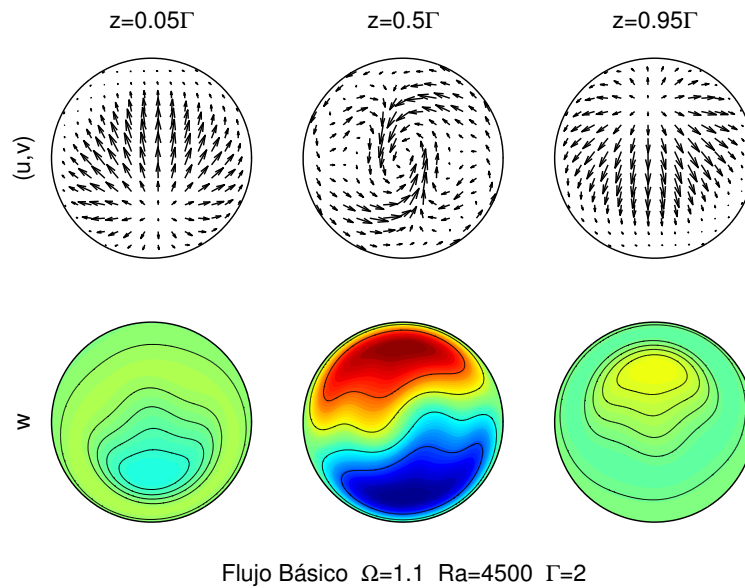


Figura 4.2: Flujo de velocidad transversal (arriba) e isolíneas de la velocidad axial (abajo) en tres secciones transversales situadas en $z = 0.05\Gamma$, $z = \Gamma/2$ and $z = 0.95\Gamma$. El eje z positivo es perpendicular al papel apuntando hacia dentro. ($Ra = 4500$, $\Omega = 1.1$). ($\vec{\Omega} = -\Omega \hat{z}$).

Sin embargo, las principales características de las soluciones del estado básico varían cuando se incrementa la velocidad de rotación. En la Figura 4.5 se muestra el flujo transversal y las isolíneas de la velocidad axial en la sección transversal $z = \Gamma/2$ para diferentes velocidades de rotación $\Omega = 0, 1.1, 5.1$ para el mismo valor del número de Rayleigh $Ra = 3400$. Para visualizar mejor el flujo, no hemos usado la misma escala para la longitud de las flechas en cada figura. Observamos que hay cambios importantes en los flujos transversales en la sección transversal media entre cada una de las figuras. Se observa cómo el flujo es arrastrado por el movimiento de la pared, sólo de forma parcial en el caso de $\Omega = 1.1$ y completamente dominado por la rotación para el caso de $\Omega = 5.1$. Debajo se muestra las líneas de igual amplitud de la velocidad axial,

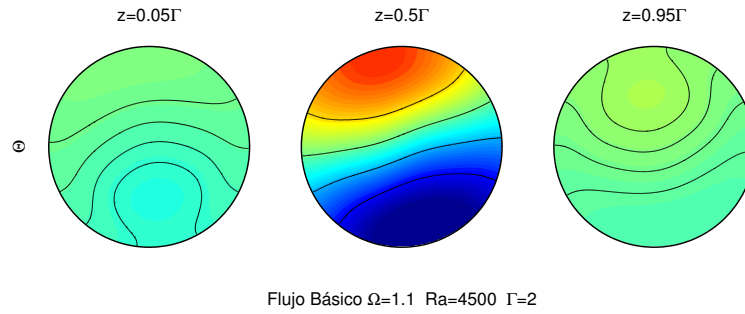


Figura 4.3: Islíneas de la desviación de temperatura Θ en las mismas secciones transversales que la Figura 4.2 ($z = 0.05\Gamma$, $z = \Gamma/2$ and $z = 0.95\Gamma$). El eje z positivo es perpendicular al papel y apuntando hacia dentro. ($Ra = 4500, \Omega = 1.1$). ($\vec{\Omega} = -\Omega \hat{z}$).

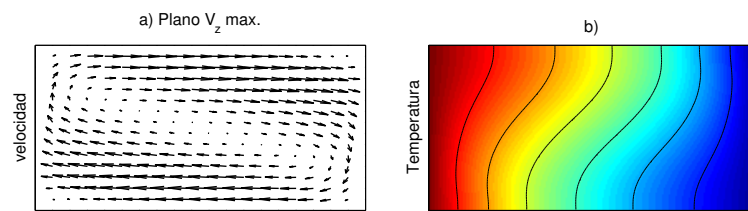


Figura 4.4: a) Flujo de velocidad longitudinal y b) líneas de amplitud de la temperatura en el plano en el cual la velocidad axial w es máxima ($Ra = 4500, \Omega = 1.1$)

en la cual vemos claramente la inclinación del flujo longitudinal. La posición del valor máximo para $\Omega = 0$ está en los $\theta = 180$ grados en nuestro sistema de referencia (ver que en la Figura 4.1 es el ángulo que forma con el eje x positivo que está en posición vertical y hacia abajo). La inclinación para $\Omega = 1.1$ es aproximadamente $\theta = 174$ grados, mientras que para $\Omega = 5.1$ es $\theta = 118$ grados. Esta inclinación ha sido calculada a partir del punto de máxima velocidad axial.

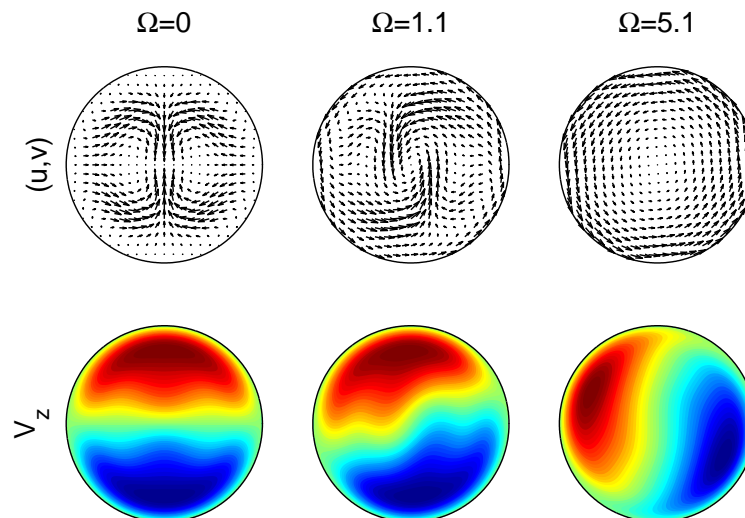


Figura 4.5: Flujo transversal (arriba) e islíneas de la velocidad axial w (debajo) en la sección transversal central $z = \Gamma/2$ para las velocidades angulares $\Omega = 0, 1.1, 5.1$ y número de Rayleigh $Ra = 3400$. El eje z positivo es perpendicular al papel y apuntando hacia adentro. ($\vec{\Omega} = -\Omega \hat{z}$).

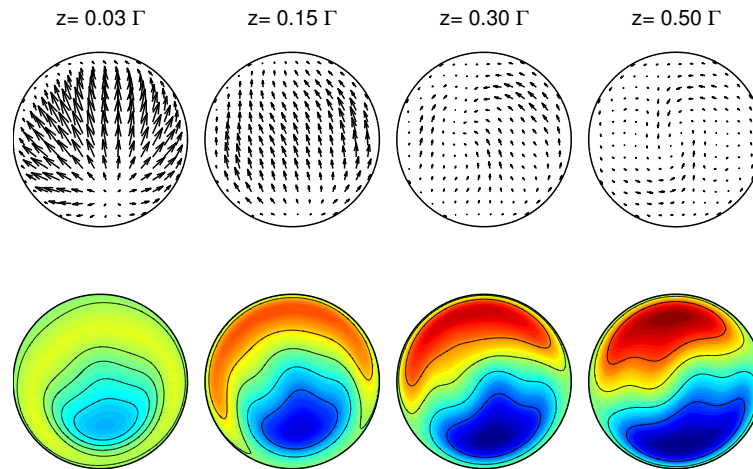


Figura 4.6: Flujo transversal (arriba) e isolíneas de la velocidad axial (abajo) w en diferentes secciones transversales para la velocidad angular $\Omega = 1.1$. Número de Rayleigh $Ra = 3400$. El eje z positivo es perpendicular al papel y apunta hacia dentro. ($\vec{\Omega} = -\Omega \hat{z}$).

Podemos obtener una mayor información sobre los flujos de estas soluciones en la Figura 4.6 y la Figura 4.7. En la Figura 4.6 se muestra el flujo transversal en diferentes secciones transversales para una velocidad angular de $\Omega = 1.1$ y en la Figura 4.7 para 5.1 y el mismo valor de Rayleigh $Ra = 3400$. Sólo se muestran secciones transversales de la mitad izquierda del cilindro porque en la otra mitad el flujo es el obtenido al aplicar la transformación R_2 . No hemos usado la misma escala de amplitud para la longitud de las flechas en las Figura 4.6 y Figura 4.7 pero si hemos mantenido la misma escala para las diferentes secciones transversales dentro de una misma velocidad de rotación.

Para $\Omega = 1.1$ la velocidad máxima transversal es de 3.01 y se halla cercana a las tapas del cilindro y para $\Omega = 5.1$ es de 2.55, es decir, el valor correspondiente a la velocidad azimutal en la pared. Para $\Omega = 1.1$ en la sección transversal media la velocidad transversal máxima es 0.65. Las isolíneas de la velocidad axial w se muestran en la parte inferior de cada figura. La velocidad máxima axial decrece con el incremento de Ω , siendo $w = 4.38$ para $\Omega = 0$, $w = 4.30$ para $\Omega = 1.1$ y $w = 2.8$ para $\Omega = 5.1$.

La diferencia entre los flujos se atribuye a la competencia entre el movimiento convectivo provocado por el gradiente térmico y el movimiento de rotación de la pared. Esta competencia es significativa sólo en valores bajos de rotación. De la Figura 4.8 podemos inferir este hecho, donde hemos representado la energía cinética total en función de la velocidad de rotación de la pared Ω . En esta región de valores bajos de Ω , en la cual los dos efectos son comparables, cuando la rotación crece, el flujo longitudinal se hace más lento, y decrece la energía cinética. Pero a partir de cierto valor de la velocidad de rotación, la rotación empieza a dominar el flujo, tanto mayor cuanto mayor sea el número de Rayleigh, y la energía cinética comenzará a crecer. Por ejemplo, podemos notar cómo la solución mostrada en la Figura 4.7 para $\Omega = 5.1$ y $Ra = 3400$ está localizada en la región donde la energía empieza a aumentar debido a la rotación (Figura 4.8a)),

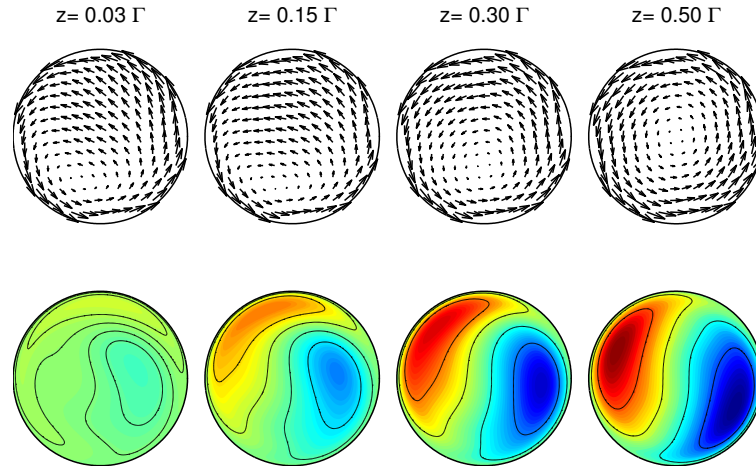


Figura 4.7: Flujo transversal (arriba) e isolíneas de la velocidad axial (abajo) w en diferentes secciones transversales para la velocidad angular $\Omega = 5.1$. Número de Rayleigh $Ra = 3400$. El eje z positivo es perpendicular al papel y apunta hacia dentro. ($\vec{\Omega} = -\Omega \hat{z}$).

mientras que si analizamos la misma velocidad de rotación para un número de Rayleigh mayor, por ejemplo la solución para $Ra = 4500$ mostrada en la Figura 4.9, obtendremos un flujo dominado por la convección natural, en el cual las principales características del tipo de flujo mostrado en la Figura 4.6 pueden aún ser identificadas.

En la Figura 4.10 presentamos la solución en diferentes secciones transversales para valores de $\Omega = 8.1$ y $Ra = 4500$. En ella observamos como la dirección de la velocidad transversal sigue un camino casi circular en todas las secciones transversales mostradas. En la Figura 4.11 mostramos el plano longitudinal donde la velocidad axial tiene su máximo valor ($w = 2.4$). Este plano está situado en un ángulo de $\theta = 97$ grados, es decir, es un plano muy cercano al plano horizontal $x = 0$. Comparando la Figura 4.11 con la mostrada en la Figura 4.4 para el mismo número de Rayleigh observamos los fuertes cambios que provoca en el flujo el efecto de la rotación tanto en la distribución de la velocidad como en las isolíneas de temperatura. La distribución de temperatura deja de tener el gradiente vertical estable en el centro y va tendiendo a un gradiente horizontal.

En la Figura 4.8b) mostramos el número de Nusselt en función de la velocidad angular. En la figura observamos que la rotación frena el transporte convectivo independientemente de si la rotación domina o no al flujo [Fujiwara et al., 1998]. Las dos zonas, la dominada por la convección o por la rotación, están separadas por un punto de inflexión en las curvas.

Otro efecto que se manifiesta con el incremento de la velocidad de rotación es la reducción de la diferencia entre los valores extremos de la temperatura en cada sección transversal. Esto da lugar a una homogeneización de la temperatura en concordancia con la atenuación del flujo longitudinal. Podemos observar este efecto en la Figura 4.12 en la que mostramos la diferencia entre la máxima y la mínima temperatura en cada sección transversal para diferentes valores de $\Omega = 1.1, 5.1, 8.1$ y para el número $Ra = 4500$. El último valor de Ω es el único dominado por la rotación para este valor de Rayleigh (ver Figura 4.10).

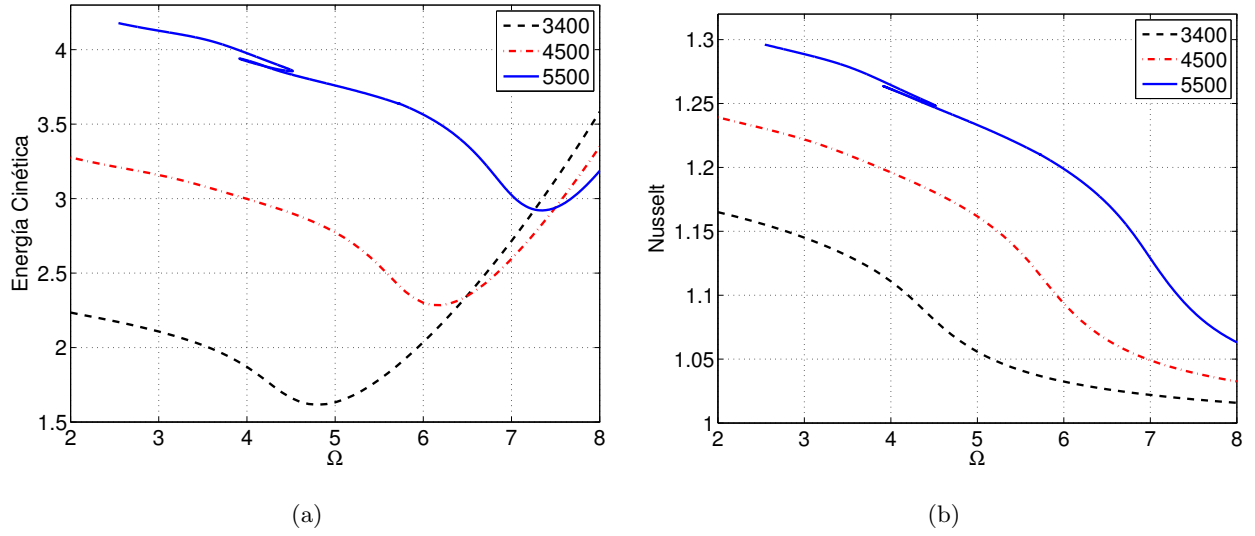


Figura 4.8: a) Energía cinética total y b) Número de Nusselt en función de la velocidad de rotación Ω para diferentes valores del número de Rayleigh $Ra = 3400, 4500, 5500$.

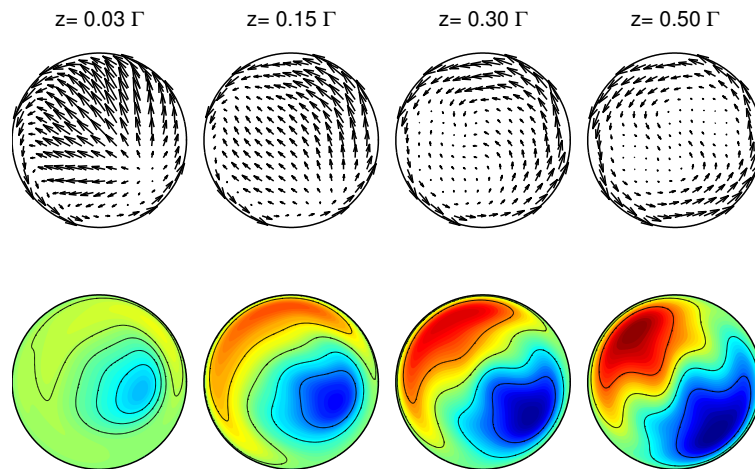


Figura 4.9: Flujo transversal (arriba) e isolíneas de la velocidad axial w (abajo) en diferentes secciones transversales para la velocidad angular $\Omega = 5.1$. Número de Rayleigh $Ra = 4500$. El eje z positivo es perpendicular al papel y apunta hacia dentro. ($\vec{\Omega} = -\Omega \hat{z}$).

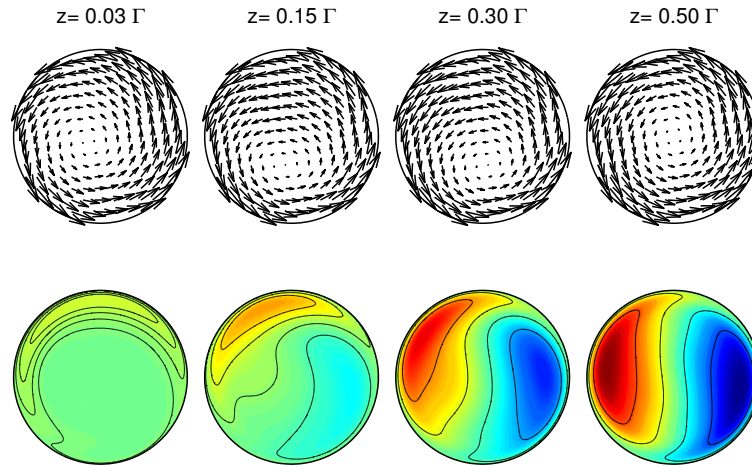


Figura 4.10: Flujo transversal (arriba) e isolíneas de la velocidad axial w (abajo) en diferentes secciones transversales para la velocidad angular $\Omega = 8.1$. Número de Rayleigh $Ra = 4500$. El eje z positivo es perpendicular al papel y apunta hacia dentro. ($\vec{\Omega} = -\Omega \hat{z}$).

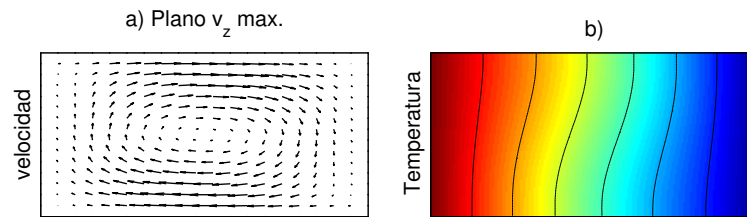


Figura 4.11: a) Flujo de velocidad longitudinal y b) líneas de amplitud de la temperatura en el plano en el cual la velocidad axial w es máxima ($Ra = 4500, \Omega = 8.1$). ($\vec{\Omega} = -\Omega \hat{z}$).

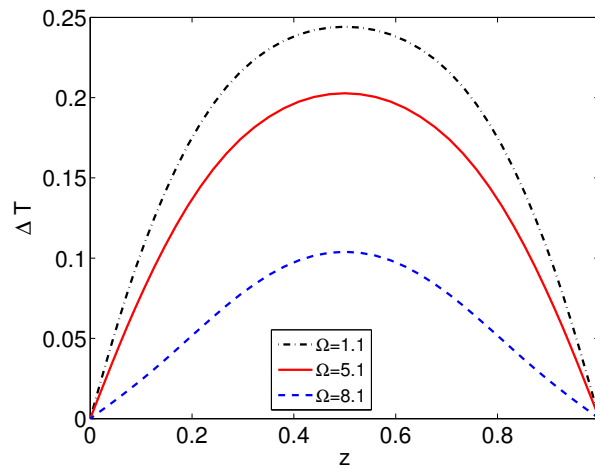


Figura 4.12: Diferencia de máxima y mínima temperatura en cada sección transversal a lo largo de la coordenada z para diferentes valores de velocidad angular $\Omega = 1.1, 5.1, 8.1$) para $Ra = 4500$.

En la Figura 4.8 a) observamos en la curva de soluciones para número de *Rayleigh* = 5500 que hay una región entre $3.8 < \Omega < 4.5$ donde existen tres soluciones. La curva zigzaguea entre dos puntos identificados como puntos de nodo *saddle* donde las soluciones cambian su estabilidad. En la Figura 4.13 ampliamos esta región mostrando con más detalles dos curvas de soluciones estacionarias y simétricas- R_2 para $Ra = 5500$ y $Ra = 5600$ en función de Ω . Vemos que en valores cercanos a $\Omega \approx 4$ hay tres soluciones en cada una de las curvas para el mismo valor de Rayleigh y velocidad de rotación pero con diferentes valores de energía cinética. Esta situación corresponde a la existencia de dos curvas desconectadas, como se muestra en la Figura 4.14, donde mostramos la gráfica de la amplitud de una cantidad global representativa de las soluciones en función del número de Rayleigh, para una velocidad angular de $\Omega = 4.4$. Observamos en este ejemplo tres ramas: la rama azul nace en valores pequeños y continúa a valores superiores de Rayleigh, mientras que las ramas roja y negra (la primera inestable y la segunda estable hasta algún valor del Rayleigh) continúan para valores superiores del Rayleigh. La amplitud seleccionada ha sido la contribución del modo azimutal cero de la energía cinética E_0 definida como

$$E_0 = \frac{4}{\Gamma} \int_0^{1/2} \int_0^\Gamma (|\hat{u}_0|^2 + |\hat{v}_0|^2 + |\hat{w}_0|^2) r dr dz$$

En la misma figura mostramos tres puntos cuyas soluciones for $Ra = 5600$ son mostradas debajo, específicamente se muestran las isolíneas de la componente z de la vorticidad. Observamos como la estructura de las soluciones de las ramas más cercanas (azul (b) y roja (c)) son casi idénticas, mientras que la estructura de la solución de la rama de color negro difiere con respecto a las otras dos. Como veremos más adelante, las soluciones (b) y (c) para esta región de valores del número de Rayleigh son cada vez más parecidas a medida que se incrementa el valor de Ω hasta que en un punto de codimensión 2 (Ra, Ω) se produce una bifurcación tipo *branching* o transcítica en el que las ramas de soluciones (b) y (c) se conectan. Más allá de esta bifurcación obtenemos dos nuevas curvas desconectadas de soluciones y dos nuevos puntos de nodo *saddle*. Analizaremos la estabilidad de las soluciones en las tres ramas en la próxima sección en función del número de Rayleigh para un rango de valores de la velocidad de rotación desde $\Omega = 0$ hasta $\Omega = 5$. Esta es la región en el cual el flujo no está dominado por la rotación, pero si influye en el flujo longitudinal del fluido, como ya se ha comentado. La posición del punto de nodo *saddle* de la Figura 4.14 para cada valor de Ω limita la región en la cual las tres ramas de soluciones existen.

4.3.2. Estabilidad lineal del flujo básico para $0 < \Omega < 5$

En esta sección presentaremos los resultados correspondientes al análisis de estabilidad lineal del flujo básico del fluido contenido en el cilindro horizontal de parámetro de forma $\Gamma = 2$ y número de Prandtl $Pr = 0.01$ para un rango de velocidades de rotación desde $\Omega = 0$ hasta $\Omega = 5$.

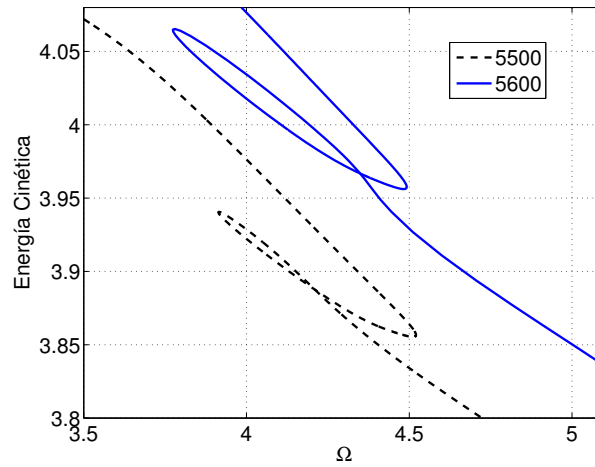


Figura 4.13: Energía cinética total en función de la velocidad de rotación Ω para diferentes valores del número de Rayleigh $Ra = 5500, 5600$

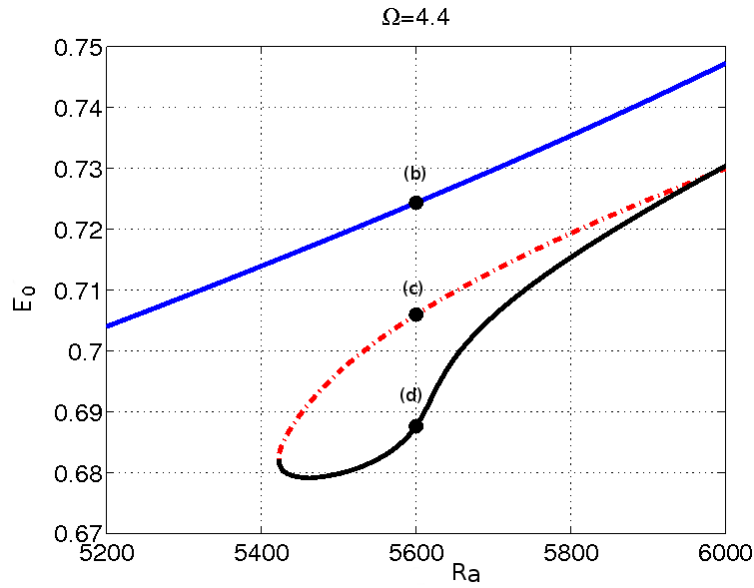
Como ya hemos expuesto en Sec. 4.3.1 el estado básico es estacionario y simétrico— R_2 . Las inestabilidades de dicho estado básico pueden ser estacionarias rompiendo la simetría R_2 (con el autovector dominante siendo antisimétrico con respecto a esta simetría rota); u oscilatorias que pueden mantener o no dicha simetría. Obviamente, una bifurcación de nodo *saddle* (una bifurcación estacionaria manteniendo la simetría) es también posible. El análisis de estabilidad es extendido a las dos curvas de soluciones con iguales propiedades que hemos identificado en nuestro problema.

- Estabilidad lineal para $0 < \Omega < 3$

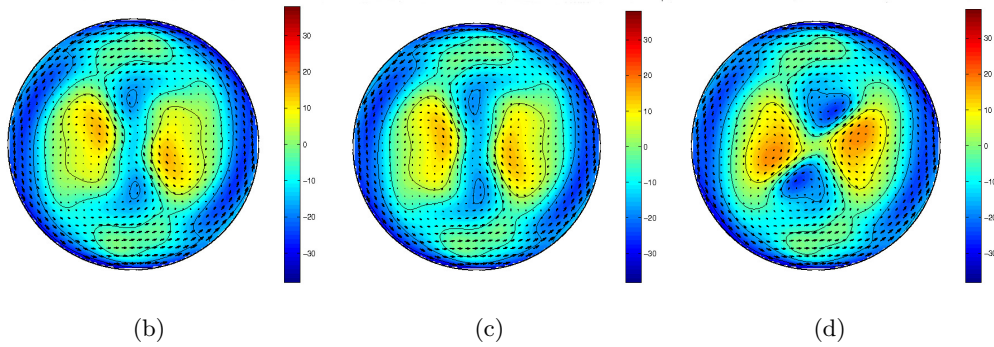
Del análisis de estabilidad para valores de velocidad de rotación entre el rango $0 < \Omega < 3.5$ y pequeños valores de Rayleigh, las inestabilidades primarias obtenidas son bifurcaciones de Hopf. Los valores críticos para el número de Rayleigh y frecuencia angular correspondientes en función de Ω son mostrados en la Figura 4.15.

En esta región obtenemos dos tipos de inestabilidades:

- la línea roja discontinua es una bifurcación de Hopf que rompe la simetría R_2 y se extiende desde $\Omega = 0$ hasta $\Omega \approx 1.33$. Esta inestabilidad tiene un importante efecto estabilizador, ya que el Rayleigh crítico aumenta considerablemente al aumentar Ω .
- la línea negra continua es también una bifurcación de Hopf que preserva la simetría R_2 . Esta inestabilidad, que se hace dominante aproximadamente entre $\Omega \sim 1.33$ y $\Omega \sim 3$, tiene un efecto estabilizador muy tenue del flujo.
- La línea azul discontinua con puntos indica la posición de los puntos de bifurcación de nodo *saddle* que limita la zona en la cual existen las tres ramas de soluciones estacionarias R_2 invariantes (ver Figura 4.14). Como discutiremos posteriormente, partiendo de esta línea, para $\Omega < 3.45$ las dos ramas de esta curva desconectada son inestables.



(a)



(b)

(c)

(d)

Figura 4.14: (a) E_0 vs. número de Rayleigh para $\Omega = 4.4$, mostrando la existencia de dos curvas desconectadas: la rama azul continúa a valores más pequeños de Rayleigh, mientras que las ramas roja y negra (la primera inestable y la segunda estable hasta algún valor del Rayleigh) continúan para valores superiores del Rayleigh.

(b), (c) y (d) representan las isolíneas de la componente z de la vorticidad en la sección transversal $z = 0.5\Gamma$ para cada una de las soluciones marcadas con puntos negros en (a). El eje z positivo es perpendicular al papel y está dirigido hacia dentro. ($\vec{\Omega} = -\Omega \hat{z}$).

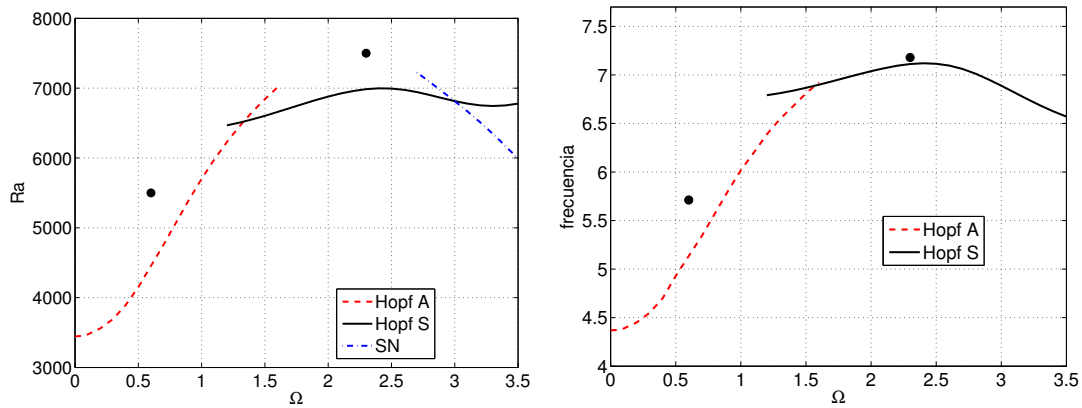


Figura 4.15: a) Número de Rayleigh crítico y b) frecuencia angular correspondiente de la inestabilidad primaria del flujo básico (bifurcación de Hopf) en función de la velocidad de rotación (valores pequeños). La línea discontinua roja es una bifurcación de Hopf que rompe la simetría R_2 , la línea continua negra es una bifurcación de Hopf que mantiene la simetría R_2 , la línea azul discontinua con puntos marca la posición de los puntos de nodo *saddle* que limita la zona en la cual existen las tres ramas de soluciones estacionarias con la simetría R_2 .

Los puntos incluidos en la gráfica corresponden a los valores de parámetros en los cuales el flujo secundario se mostrará más adelante.

- Estabilidad lineal para $3 < \Omega < 5$

En la Figura 4.16 mostramos el diagrama de bifurcaciones extendido hasta $\Omega \approx 5$, en el que hemos representado las curvas críticas de las bifurcaciones que en algunas zonas son dominantes en el espacio de parámetros (Ra, Ω) para todas las soluciones estacionarias e invariantes a R_2 . En ella identificamos distintos tipos de bifurcaciones que representamos de la siguiente forma: con cuadrados representamos las bifurcaciones de Hopf, con círculos bifurcaciones de nodo *saddle* y con triángulos negros bifurcaciones de Pitchfork. Estas bifurcaciones están distribuidas en 4 regiones con diferentes dinámicas

En la región marcada con I existe una única curva de soluciones que se inestabiliza en una bifurcación de Hopf (cuadrados negros) que mantiene la simetría R_2 ;

En la región II existen dos curvas con tres ramas de soluciones, una curva comienza desde valores bajos de Rayleigh y es estable hasta la bifurcación de Hopf (cuadrados negros) que mantiene la simetría R_2 y la otra curva formada por dos ramas inestables que nacen en los puntos de nodo *saddle* representados con círculos azules.

En la región III existen dos curvas con tres ramas de soluciones. La que comienza desde valores bajos de Rayleigh, en la región $\Omega \in (3, 4)$, y es estable hasta la bifurcación de Hopf (cuadrados negros) que mantiene la simetría R_2 . En la región $\Omega \in (4, 4.2)$ esta rama estable pierde su estabilidad en una bifurcación de Pitchfork que no preserva la simetría R_2 (triángulos negros) y en la región Ω entre ≈ 4.2 y ≈ 4.5 esta rama bifurca a una solución oscilatoria que mantiene la simetría R_2 (cuadrados negros). Las otras dos ramas, que nacen en los puntos de nodo *saddle* (círculos azules), para valores mayores de $\Omega = 3.45$ una es inestable y la otra es estable hasta

que pierde su estabilidad en una bifurcación de Hopf con la simetría R_2 (cuadrados azules). La discontinuidad observada en esta curva cerca de $\Omega = 4.2$ es debida a que la dependencia de la parte real del valor propio con el Rayleigh es de tipo “cúbico” (Figura 4.17) y el valor del Rayleigh para el que la parte real del valor propio pasa por cero, sufre una discontinuidad como se deduce de la Figura 4.16.

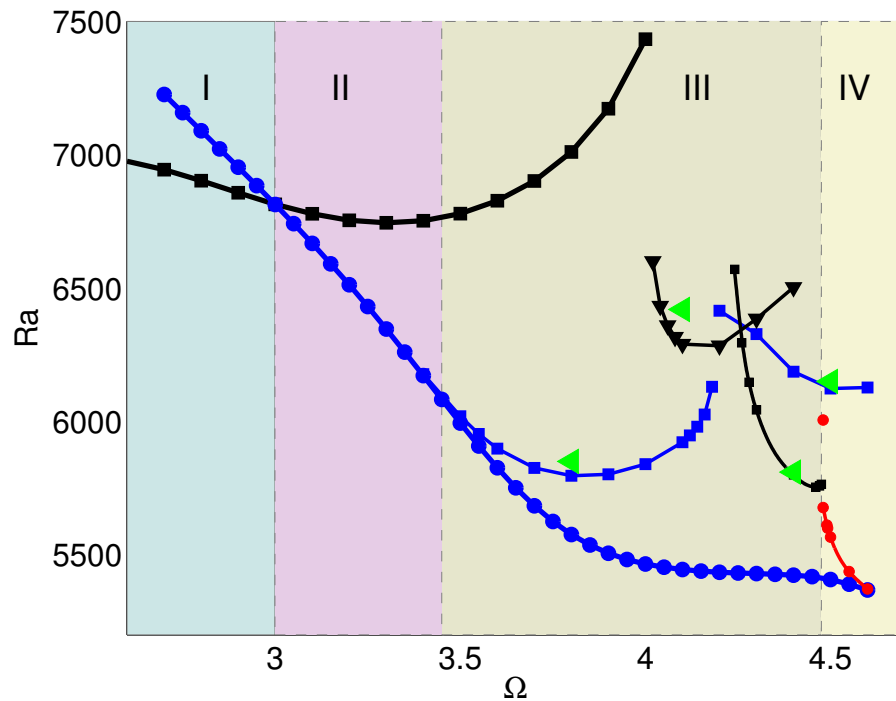


Figura 4.16: Diagrama de bifurcación extendido en el espacio de parámetros (Ra, Ω) . Los flujos básicos cuya estabilidad son analizadas son estacionarios con la simetría R_2 . Para más detalles ver el texto. Los círculos denotan puntos de nodo *saddle*, los cuadrados bifurcaciones de Hopf y los triángulos bifurcaciones de Pitchfork. Los triángulos verdes representan los valores de Ω y Ra cuyas soluciones serán mostradas posteriormente.

En la región IV existen dos curvas, la que proviene de Rayleigh pequeños zigzaguea y tiene tres ramas de soluciones (dos estables y una inestable) en la región acotada por los puntos de nodo *saddle* (círculos azules y rojos) que desaparecen en la bifurcación tipo cúspide y la otra curva de soluciones con dos ramas inestables que nacen en los puntos de nodo *saddle* (círculos rojos) ubicados en números de Rayleigh superiores.

4.3.2.1. Estabilidad lineal para $\Omega \approx 3.45$

Aquí presentaremos los resultados correspondientes al análisis de estabilidad de las soluciones de las curvas desconectadas cercanas a $\Omega = 3.45$. Para ayudar a entender estos resultados usaremos esquemas, en el cual mostraremos los puntos de bifurcación más representativos y los signos de los correspondientes autovalores. En el esquema de la Figura 4.18 mostramos la curva desconectada para valores fijos de velocidad de rotación $\Omega = 3, 45, 3.44, 3.43, 3.42$. Como en la figura previa (Figura 4.19), los cuadrados azules denotan la bifurcación de Hopf con baja

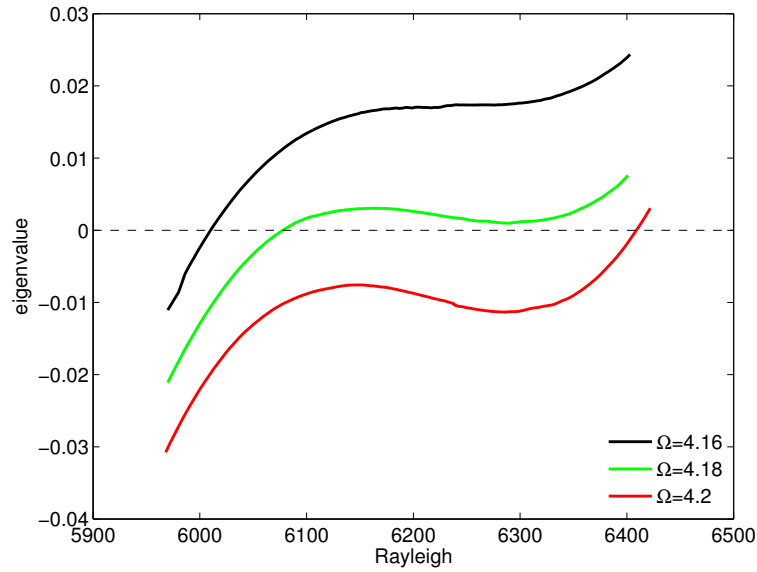


Figura 4.17: Parte real del valor propio en función del número de Rayleigh para diferentes valores de Ω , de la bifurcación de Hopf de las soluciones que pertenecen a una de las ramas que nacen en los puntos de nodo *saddle* representados por círculos azules en la Figura 4.16 y que en esta misma figura están representados por cuadrados azules

frecuencia que mantiene R_2 . Usamos cuadrados rojos para marcar una bifurcación de Hopf que no mantiene R_2 con una frecuencia mayor y marcamos el signo de la parte real de su autovalor dominante en color rojo también. Esta bifurcación no está incluida en la Figura 4.16. El signo de los autovalores asociados a la bifurcación que mantiene R_2 son impresos en azul. Los autovalores correspondientes a cada bifurcación están representados con el mismo color del cuadrado. Dos signos iguales encerrados en paréntesis representan un par de autovalores complejos conjugados, dos signos sin paréntesis refiere a dos autovalores reales. En los cuatro esquemas, el número de Rayleigh estaría localizado en el eje horizontal que se incrementa hacia la derecha. Las líneas de mayor espesor significan tramos de la curva donde las soluciones son estables.

Las transiciones observadas en cada esquema a medida que disminuye la velocidad de rotación es la siguiente:

- I En $\Omega = 3.45$ tenemos dos bifurcaciones de Hopf en diferentes ramas, con una región estable desde el punto de nodo *saddle* hasta el punto de bifurcación de Hopf de baja frecuencia (cuadrado azul).
- II Desde $\Omega = 3.45$ hasta $\Omega = 3.44$ ha tenido lugar una bifurcación de fold-Hopf donde la bifurcación de Hopf “roja” que no preserva la simetría R_2 ha cambiado de rama y se ha reducido la zona estable. Al mismo tiempo la bifurcación de Hopf “azul” se aproxima al nodo *saddle* decreciendo su frecuencia.
- III Desde $\Omega = 3.44$ hasta $\Omega = 3.43$, la bifurcación de Hopf “roja” se desplaza hacia valores mayores del número de Rayleigh y la Hopf “azul” se acerca al punto de nodo *saddle* decreciendo su frecuencia. Las dos bifurcaciones de Hopf intercambian de posición y por tanto ya no hay zonas de curva que sean estables.

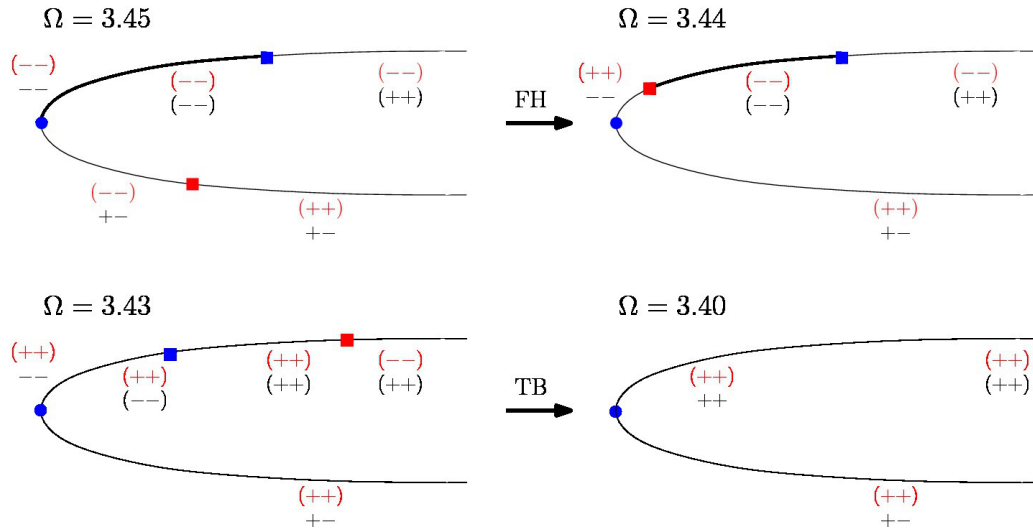


Figura 4.18: Imágenes esquemáticas mostrando la curva desconectada para valores fijos de la velocidad de rotación para $\Omega = 3,45, 3.44, 3.43, 3.42$. Los cuadrados azules denotan una bifurcación de Hopf de baja frecuencia que mantiene la simetría R_2 , los cuadrados rojos marcan una bifurcación de Hopf que rompe la simetría R_2 . Los autovalores correspondientes a cada bifurcación están representados con el mismo color del cuadrado. Dos signos iguales encerrados en paréntesis representan un par de autovalores complejos conjugados, signos sin paréntesis se refieren a autovalores reales. La líneas gruesas representan tramos de la curva cuyas soluciones son estables.

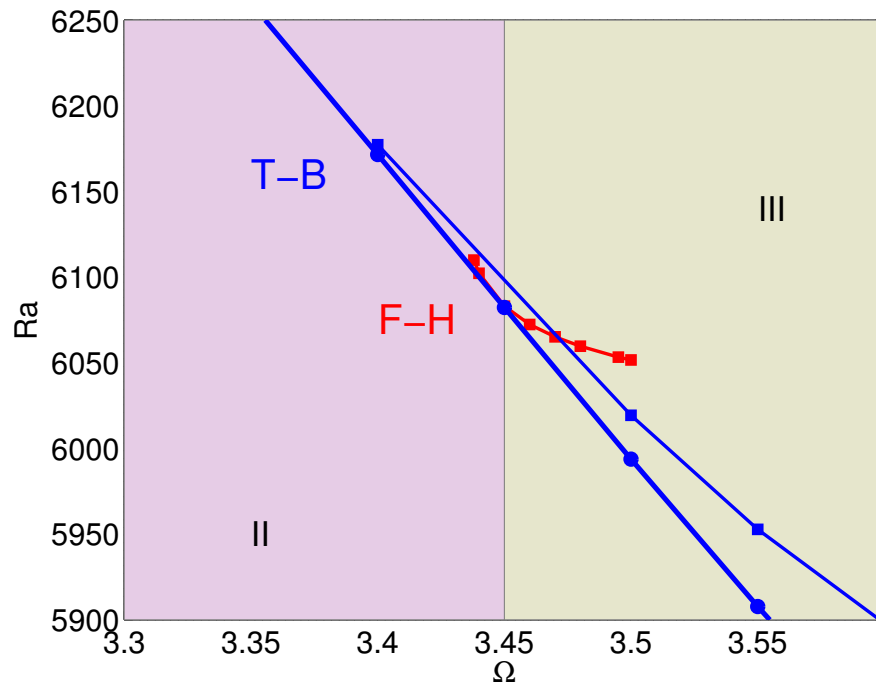


Figura 4.19: Detalle del diagrama de bifurcación de la Figura 4.16 en el espacio de parámetros Ra, Ω : Los cuadrados azules marcan la localización de una bifurcación de Hopf de baja frecuencia que mantiene la simetría R_2 , los cuadrados rojos marcan una bifurcación de Hopf que rompe R_2 y los círculos azules los puntos de nodo *saddle*

IV Desde $\Omega = 3.43$ hasta $\Omega = 3.42$ la bifurcación “azul” desaparece en una bifurcación de Takens-Bogdanov. En los cuatro esquemas tienen lugar varias transiciones de dos reales a un par de complejos conjugados y al contrario. Esto ha sido representado en los esquemas pero no lo comentamos en el texto ya que no representan puntos de bifurcación.

El diagrama de bifurcación real en esta región se muestra en la Figura 4.19. Esta figura es una ampliación de la región cercana al valor de $\Omega = 3.45$ a partir de la cual para valores menores de Ω las dos ramas de la curva desconectada que cruza el nodo *saddle* comienzan a ser inestables. La línea con cuadrados rojos representa una bifurcación de Hopf que no mantiene la simetría R_2 . La posición de la otra bifurcación de Hopf y los puntos de nodos *saddle* se han representado con los mismos símbolos usados en las imágenes esquemáticas de la Figura 4.18.

4.3.2.2. Estabilidad lineal para $\Omega \approx 4.5$

Los resultados correspondientes al análisis de estabilidad de las soluciones básicas en la región cercana a $\Omega = 4.5$ serán mostrados y discutidos a continuación. Las dos curvas de soluciones (la que se extiende a valores más bajos de Rayleigh y la curva desconectada) cambian la estabilidad en esta región dando lugar a un diagrama de bifurcaciones complejo. Para ayudar a entender los resultados usaremos nuevamente una imagen esquemática, en la cual mostraremos los puntos de bifurcaciones más representativos y el signo de los correspondientes autovalores. En el esquema de la Figura 4.20 (a) se muestra la curva de los valores fijos de velocidad de rotación $\Omega = 4.47$, un valor no especificado de Ω entre 4.47 y 4.48, $\Omega = 4.48$ y $\Omega = 4.6$. Usamos un cuadrado azul para representar la bifurcación de Hopf, la cual mantiene la simetría R_2 , un cuadrado negro para representar una bifurcación de Hopf de baja frecuencia, la cual mantiene la simetría R_2 , un cuadrado rojo para representar una bifurcación de Hopf que rompe la simetría R_2 , con los signos de los autovalores correspondientes también pintados en color rojo. Esta bifurcación no está incluida en la Figura 4.16. El signo de los autovalores correspondientes a la bifurcación de Hopf de baja frecuencia (cuadrados negros), que mantiene la simetría R_2 , son escritos en color negro. Como en el diagrama esquemático previo dos signos iguales entre paréntesis representan un par de números complejos conjugados, el número de Rayleigh estaría en el eje horizontal incrementándose hacia la derecha y líneas gruesas significan que las soluciones en ese tramo de las curvas son estables.

Las transiciones observadas en esta zona a medida que se incrementa la velocidad de rotación son las siguientes:

1. En $\Omega = 4.47$ tenemos dos bifurcaciones de Hopf en la curva que se extiende a valores bajos del número de Rayleigh. La bifurcación dominante es una bifurcación de Hopf de baja frecuencia que mantiene R_2 (cuadrados negros), seguida por una bifurcación de Hopf que rompe la simetría con frecuencia crítica $\omega \approx 2.5$ (cuadrados rojos). Una rama de la curva desconectada es estable hasta que ocurre la bifurcación de Hopf (cuadrado azul) que mantiene la simetría. Esta bifurcación puede ser continuada decreciendo el valor de Ω hasta

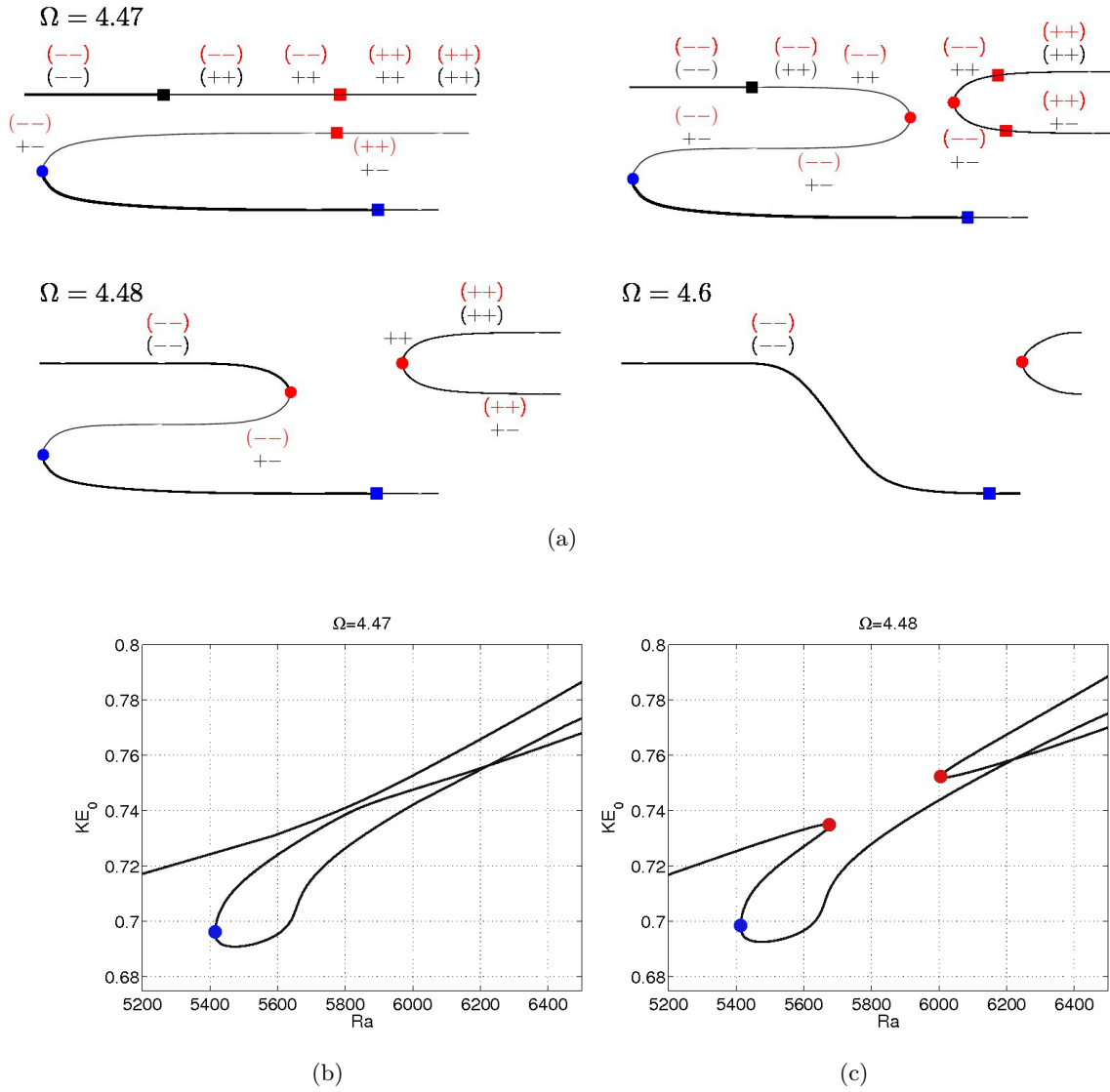


Figura 4.20: (a) Imágenes esquemáticas mostrando las curvas desconectadas para valores fijos de velocidad de rotación $\Omega = 4.47, \approx 4.475, 4.48, 4.6$. Los cuadrados azules y negros representan bifurcaciones las cuales mantienen la simetría R_2 , un cuadrado rojo representa una bifurcación de Hopf la cual rompe la simetría R_2 y cuyos autovalores han sido escritos en color rojo. Autovalores asociados a la bifurcación que mantiene la simetría R_2 , dibujados con un cuadrado negro, son escritos en negro. Círculos rojos representan puntos de nodo *saddle*. Dos signos iguales entre paréntesis representan un par de números complejos conjugados. Las líneas gruesas significan que esa parte de la curva es estable. Los diagramas de bifurcación reales para (b) $\Omega = 4.47$ y (c) $\Omega = 4.48$, muestran la contribución del modo cero azimutal a la energía cinética E_0 de las soluciones en función del número de Rayleigh. La posición de las tres bifurcaciones de Hopf y los puntos de nodo *saddle* son representados usando el mismo símbolo que los usados en las imágenes esquemáticas.

que obtenemos la bifurcación de Hopf ya discutida en la zona $\Omega \approx 3.45$, la cual también es representada con un cuadrado azul. En la otra rama de la curva desconectada tenemos un autovalor positivo y uno negativo asociados a los autovectores que preservan la simetría R_2

en un sitio cercano al punto de nodo *saddle*. Cuando el número de Rayleigh se incrementa ocurre una bifurcación de Hopf que rompe la simetría con frecuencia crítica $\omega \approx 2.5$. Esta rama es siempre inestable.

2. Entre $\Omega = 4.47$ y un valor menor que $\Omega = 4.48$ tiene lugar una bifurcación de codimensión 2 cuando la curva que se extiende a valores bajos de Rayleigh y la rama inestable de la curva desconectada se conectan en algún punto entre las dos bifurcaciones de Hopf y emergen dos puntos de nodo *saddle* (representados por círculos rojos en la Figura 4.20(c)). Estos puntos de nodo *saddle* están representados en la Figura 4.16 por círculos rojos. Esta bifurcación, llamada *branching* o transcítica, es similar a la que hemos visto en el Cap. 3. Note cómo los autovalores mostrados en el dibujo esquemático para $\Omega = 4.47$ son compatibles con esta bifurcación, debido a que el par de autovalores complejos conjugados después de la bifurcación de Hopf de baja frecuencia (cuadrados negros) se convierten en dos números reales; uno de ellos decrece lo suficiente para cambiar de signo en la nueva bifurcación de nodo *saddle*.
3. Desde este valor intermedio de Ω y $\Omega = 4.48$ tiene lugar una nueva bifurcación de codimensión 2. Cuando decrece la frecuencia, la bifurcación de Hopf de baja frecuencia que mantiene R_2 (cuadrados negros), se desplaza a uno de los nuevos puntos de nodo *saddle* y desaparece en una bifurcación de Takens Bogdanov. En la nueva curva desconectada aparece una bifurcación fold-Hopf relacionada con la bifurcación de Hopf que rompe la simetría R_2 (cuadrados rojos) situándose las dos bifurcaciones de Hopf en la misma rama, seguida de la aniquilación de estas dos bifurcaciones. Al mismo tiempo esta nueva curva desconectada se mueve hacia valores más altos del número de Rayleigh.
4. Cercano a $\Omega = 4.6$ se unen los dos puntos de nodo *saddle* de la nueva curva que se extiende a valores más bajos de Rayleigh y desaparecen en una bifurcación cúspide de codimensión 2. En la Figura 4.16 mostramos los diagramas de bifurcación reales para $\Omega = 4.47$ y $\Omega = 4.48$. La posición de las tres bifurcaciones de Hopf y los puntos de nodo *saddle* son representados por los mismos símbolos usados en las imágenes esquemáticas en la Figura 4.16.

4.3.3. Soluciones secundarias

En esta sección presentaremos algunas soluciones representativas de los diferentes tipos de bifurcaciones que hemos encontrado y que aparecen en los diagramas de las Figura 4.15 y Figura 4.16.

- **Flujo oscilatorio no simétrico para $Ra = 5500$ y $\Omega = 0.6$.**

Esta solución (marcada en el diagrama de bifurcación en la Figura 4.15 con un punto negro) es oscilatoria, no mantiene la simetría R_2 y está representada en la Figura 4.21. En esta figura se muestra el campo de velocidad transversal (arriba) e isolíneas de la velocidad axial (abajo) en la sección transversal en $z = 0.5\Gamma$ para un valor de Rayleigh superior al valor de Rayleigh crítico para $\Omega = 0.6$, donde podemos observar una perturbación que rompe con la simetría R_2 . En los vectores del campo de velocidad transversal dibujados cada cuarto de

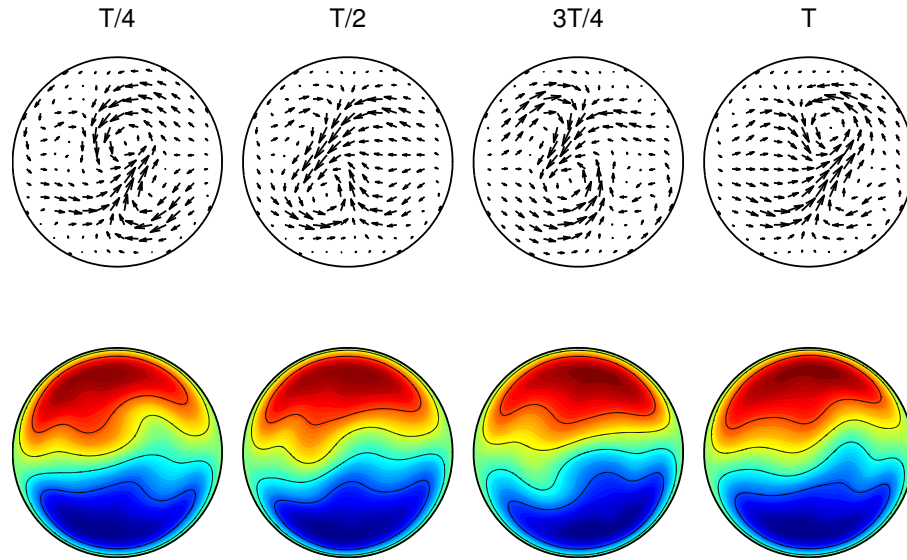


Figura 4.21: Instantáneas de los vectores de velocidad transversal (arriba) e isolíneas de la velocidad axial (abajo) para la solución oscilatoria en $Ra=5500$ $\Omega = 0.6$ en la sección transversal $z = 0.5\Gamma$, espaciadas $T/4$ con período $T = 1.1$. El eje positivo z es perpendicular al plano y apunta hacia dentro. ($\vec{\Omega} = -\Omega \hat{z}$).

período de oscilación (período de oscilación $T = 1.1$) aparece un vórtice que viaja siguiendo una trayectoria aparentemente elíptica cuyo eje mayor forma un ángulo aproximado de 45 grados con respecto al diámetro vertical. Como corresponde a las bifurcaciones de Hopf que rompen la simetría de reflexión en un sistema Z_2 , esta solución recupera la simetría R_2 si comparamos dos instantáneas separadas medio período. En la figura de abajo observamos la perturbación en las isolíneas más cercanas al plano horizontal y que de la misma forma si comparamos dos instantáneas equidistantes medio período de oscilación recuperamos la simetría con respecto al punto centro. Observamos que ambas zonas con mayor magnitud de la velocidad axial, zonas de color rojo (azul) intenso que indica dirección positiva (negativa) de la velocidad axial se desplazan lateralmente al mismo tiempo, por ejemplo, en la imagen $T/4$ aparecen desplazadas a la izquierda y medio período después $3T/4$ ambas zonas aparecen desplazadas a la derecha del observador.

- **Flujo oscilatorio simétrico para $Ra = 7500$ y $\Omega = 2.3$.**

La solución secundaria que mostraremos para $Ra = 7500$ y $\Omega = 2.3$ es oscilatoria (con período $T = 0.89$) y que preserva la simetría R_2 con respecto al punto central en la sección transversal $z = 0.5\Gamma$. En la Figura 4.22 mostramos los vectores de velocidad transversal (arriba) e isolíneas de la velocidad axial (abajo). Si comparamos la Figura 4.22 (arriba) con el flujo transversal en la Figura 4.2 de la solución básica observamos que apenas hay cambios excepto que el vórtice central cambia su forma al elongarse y contraerse periódicamente, variando su forma entre una elipse y un círculo concéntrico. Los vectores del flujo se distribuyen algo más concentrados y después más expandidos en cada semiperíodo. En

las isolíneas de la velocidad axial Figura 4.22 (abajo) observamos cómo se concentran y dilatan alrededor del punto centro.

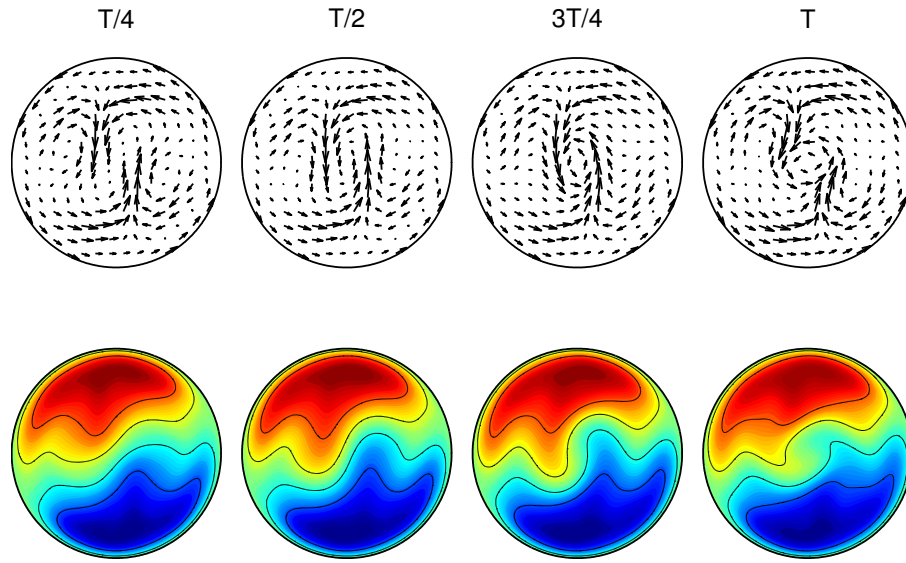


Figura 4.22: Instantáneas de los vectores de velocidad transversal (arriba) e isolíneas de la velocidad axial (abajo) para la solución oscilatoria en $Ra = 7500$ y $\Omega = 2.3$ en la sección transversal $z = 0.5\Gamma$, espaciadas $T/4$ con período $T = 0.89$. El eje positivo z es perpendicular al plano y apunta hacia dentro

- **Flujo oscilatorio simétrico para $Ra = 5850$ y $\Omega = 3.8$.**

La solución secundaria oscilatoria que mantienen la simetría R_2 para $Ra = 5850$ y $\Omega = 3.8$ se muestra en la Figura 4.23, y ha sido marcada su ubicación con un triángulo verde en la Figura 4.16. Como vemos en la Figura 4.16 esta solución secundaria no está muy alejada del punto de bifurcación ($Ra_c = 5796.4$, $\omega_c = 1.13$) por lo que la amplitud de la perturbación es aún pequeña. Esta solución pertenece a la rama estable que nace del punto de nodo *saddle* representado por círculos azules en la Figura 4.16.

En la Figura 4.23 se muestran los vectores de velocidad transversal (arriba) y las isolíneas de la componente axial de la vorticidad (abajo) en la sección transversal $z = 0.5\Gamma$. A la izquierda de la línea vertical, tenemos la solución del estado básico para las mismas variables en la misma sección transversal, mientras que a la derecha esta representada la solución oscilatoria secundaria cada cuarto de período de oscilación, el cual es de $T = 5.9$. Por la pequeña amplitud de la inestabilidad apenas podemos apreciar algún cambio en los vectores del flujo transversal. En las isolíneas de la vorticidad axial las regiones de rojo (azul) corresponde a valores positivos (negativos) de la vorticidad axial. Como el eje z positiva está dirigido para dentro del papel, valores positivos (rojo) representa un vórtice en el sentido de las manecillas del reloj y negativo (azul) representa el sentido contrario como ocurre en la region cercana a la pared. Observamos que las zonas de rojo se tornan más estrechas, lo que nos indica que los vórtices asociados se contraen y dilatan en cada período de oscilación.

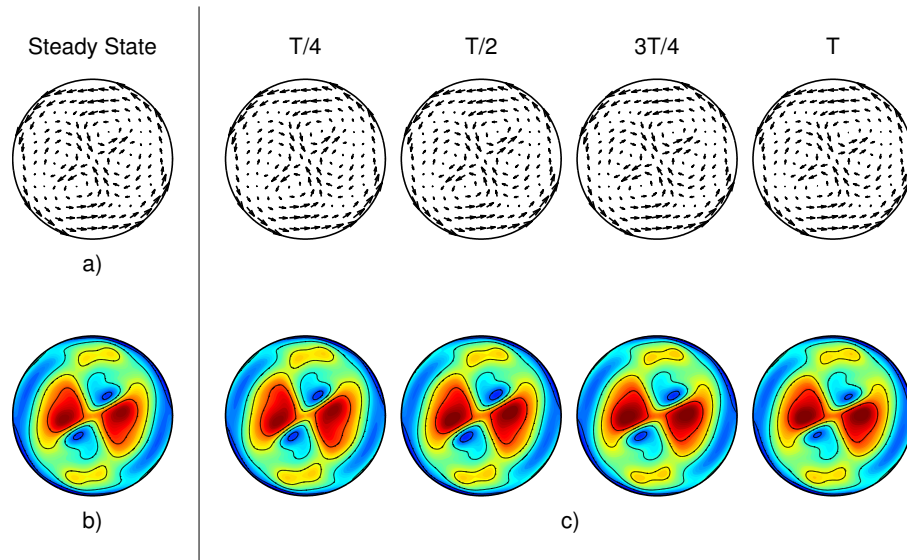


Figura 4.23: Para $(Ra, \Omega) = (5850, 3.8)$ y sección transversal $z = 0.5\Gamma$ con período $T = 5.9$ se muestran: Flujo transversal del estado básico, Isolíneas de la componente z de la vorticidad del estado básico y Instantáneas de los vectores de velocidad transversal (arriba) e isolíneas de la componente z de la vorticidad (abajo) para la solución oscilatoria espaciada $T/4$. El eje z positivo es perpendicular al papel y apunta hacia adentro.

- **Flujo estacionario no simétrico** $Ra = 6420$ y $\Omega = 4.1$.

La curva crítica en la Figura 4.16 con triángulos negros en el rango aproximado de valores de Ω entre 4 y 4.4 y número de Rayleigh $Ra \geq 6283$, representa una bifurcación de Pitchfork que no mantiene R_2 y que domina desde 4 hasta 4.42. Vimos que esta curva crítica está en una región donde cruza con otras curvas críticas, cada una representando las distintas bifurcaciones de dos ramas de soluciones: una rama estable que nace en los puntos de nodo *saddle* (curva con círculos azules) y una rama que viene de valores de Rayleigh más bajos, a la cual pertenece la solución primaria de la cual la solución que presentamos aquí bifurca. Una solución secundaria estable saturada que se genera a partir de esta inestabilidad estacionaria que no preserva R_2 es mostrada en la Figura 4.24 para $Ra = 6420$ y $\Omega = 4.1$ en la sección transversal $z = 0.5\Gamma$. El número de Rayleigh crítico de la bifurcación de Pitchfork para $\Omega = 4.1$ vale 6290.

En la Figura 4.24(a) se muestran los vectores de velocidad transversal y en la Figura 4.24(b) la velocidad axial w . En ambas figuras hemos insertado los ejes coordenados x y y y un cuadrado cuya región será ampliada abajo para mostrar detalles del campo de velocidad. Observamos que la simetría de reflexión se ha roto. Para que se cumpla la simetría, si en la Figura 4.24 (d) tomamos dos puntos a ambos lados del centro en una línea diametral, el valor de la velocidad axial en ambos puntos debe ser de igual magnitud con signo contrario y en esta figura no se observa. En la Figura 4.24(c) apreciamos esta diferencia en los vectores cercanos al centro (véase el detalle en las flechas que cruzan el eje y positivo comparado a las flechas que cruzan el eje y negativo a la misma distancia del centro).

- **Flujo oscilatorio simétrico** para $Ra = 5810$ y $\Omega = 4.4$

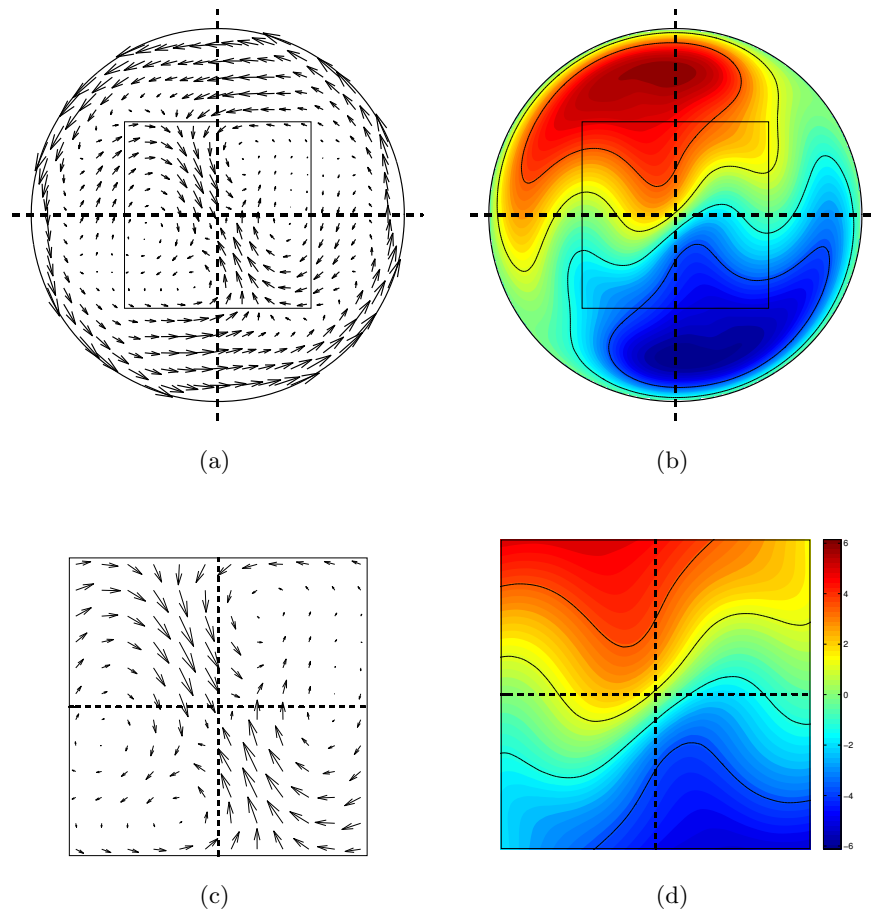


Figura 4.24: Solución secundaria estacionaria para $Ra = 6420$ y $\Omega = 4.1$ en la sección transversal $z = 0.5\Gamma$: (a) Vectores de la velocidad transversal y (b) componente axial de la velocidad, cuyos valores máximo y mínimo son 6.01 y -5.99 . Con el objetivo de observar que la solución no tiene la simetría R_2 se han dibujado líneas discontinuas representando los ejes cartesianos x (línea vertical de arriba (-) hacia abajo (+)) y y (línea horizontal de derecha (-) a izquierda (+)). En (c) ((d)) se muestra la vista ampliada del cuadro mostrado en (a) ((b)). En todas las figuras el eje z El eje z positivo es perpendicular al papel y apunta hacia adentro. ($\vec{\Omega} = -\Omega \hat{z}$).

En $Ra = 5810$ y $\Omega = 4.4$ por la curva que proviene de Rayleigh más pequeños tenemos esta solución secundaria oscilatoria que mantiene la simetría R_2 . Esta solución está muy cerca del punto de la bifurcación de Hopf de muy baja frecuencia que se encuentra en $Ra_c = 5799$, $\omega_c = 0.49$ por lo que la amplitud de la perturbación es aún pequeña.

En la Figura 4.25 son mostrados los vectores de velocidad transversal (arriba) y las isolíneas de la componente axial de la vorticidad (abajo) en la sección transversal $z = 0.5\Gamma$. A la izquierda de la línea vertical, tenemos la imagen la solución del estado básico para las mismas variables en la misma sección transversal, mientras que a la derecha está representada la solución oscilatoria secundaria cada cuarto de período de oscilación, el cual es de $T = 15.9$. Por la pequeña amplitud de la inestabilidad apenas podemos apreciar algún cambio en los vectores del flujo transversal. En las isolíneas de la vorticidad axial las regiones de rojo

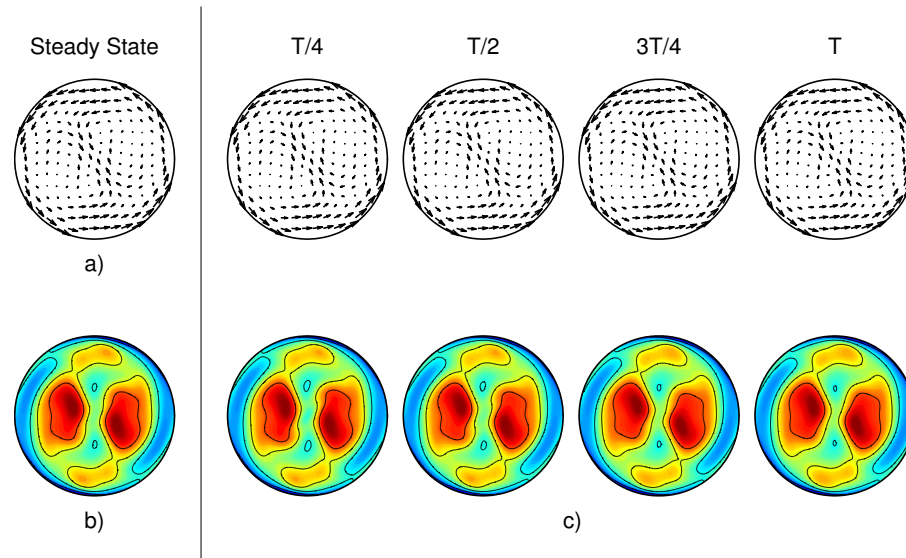


Figura 4.25: Para $(Ra, \Omega) = (5810, 4.4)$ y sección transversal $z = 0.5\Gamma$ se muestran: Flujo transversal del estado básico, Isolíneas de la componente z de la vorticidad del estado básico y Instantáneas de los vectores de velocidad transversal (arriba) e isolíneas de la componente z de la vorticidad (abajo) para la solución oscilatoria espaciada $T/4$ ($T = 15.9$). El eje z positivo es perpendicular al papel y apunta hacia adentro.

(azul) corresponde a valores positivos (negativos) de la vorticidad axial. Como el eje z positiva está dirigido para dentro del papel, valores positivos (rojo) representa un vórtice en el sentido de las manecillas del reloj y negativo (azul) representa el sentido contrario como ocurre en la región cercana a la pared.

Como esta secuencia de figuras cada cuarto de período se han dibujado con igual valor máximo y mínimo de la variable podemos apreciar que la zona central limitada por las zonas de color amarillo se estrecha y se ensancha en cada período de oscilación.

- **Flujo oscilatorio simétrico para $Ra = 6150$ y $\Omega = 4.5$.**

La bifurcación de Hopf que mantienen la simetría R_2 que surge en la rama estable que nace de los puntos de nodo *saddle* en la Figura 4.16 se extiende desde valores cercanos a $\Omega \approx 3.44$ se interrumpe en valores cercanos a $\Omega \approx 4.2$ y continúa hasta $\Omega \approx 4.6$. Ya mostramos anteriormente una solución oscilatoria secundaria de esta bifurcación para $Ra = 5850$ y $\Omega = 3.8$ (Figura 4.23). Ahora mostramos esta misma solución secundaria para un valor mayor de $\Omega = 4.5$ y $Ra = 6150$. Esta solución secundaria no está muy alejada de la bifurcación por lo que la amplitud de la perturbación es aún pequeña, donde los valores críticos de número de Rayleigh y frecuencia son $Ra_c = 6123$ y $\omega_c = 1.64$. En la Figura 4.26 se muestran los vectores de velocidad transversal (arriba) y las isolíneas de la componente axial de la vorticidad (abajo) en la sección transversal $z = 0.5\Gamma$ cada cuarto de período de oscilación, el cual es de $T = 3.83$. Por la pequeña amplitud de la inestabilidad apenas podemos apreciar algún cambio en los vectores del flujo transversal pero sí es evidente que la estructura de la solución es similar a la solución mostrada en Figura 4.23. En las isolíneas de la vorticidad axial las regiones de rojo (azul) corresponde a valores positivos

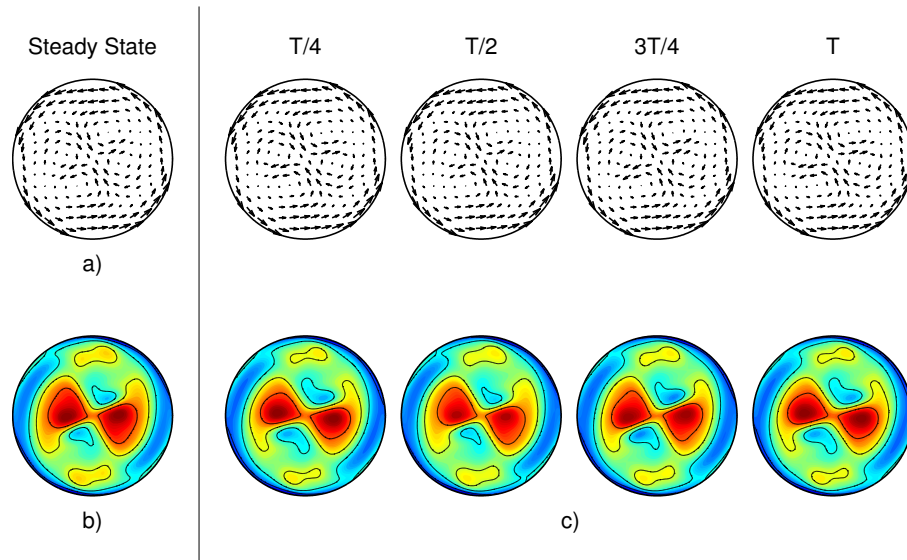


Figura 4.26: Para $(Ra, \Omega) = (6150, 4.5)$ y sección transversal $z = 0.5\Gamma$ se muestran las instantáneas de los vectores de velocidad transversal (arriba) e isolíneas de la componente z de la vorticidad (abajo) para la solución oscilatoria espaciada $T/4$. El eje z positivo es perpendicular al papel y apunta hacia adentro. ($T = 3.83$)

(negativos) de la vorticidad axial. Como el eje z positiva está dirigido para dentro del papel, valores positivos (rojo) representa un vórtice en el sentido de las manecillas del reloj y negativo (azul) representa el sentido contrario como ocurre en la región cercana a la pared. Observamos las zonas de rojo se tornan más estrechas, lo que nos indica que los vórtices asociados se contraen y dilatan en cada período de oscilación

4.4. Conclusiones

En este capítulo hemos estudiado la dinámica del fluido contenido en un cilindro horizontal mantenido a una diferencia de temperatura entre sus tapas y con rotación axial. El tamaño del cilindro ($\Gamma = 2$) y el número de Prandtl del fluido ($Pr = 0.01$) han sido mantenidos constantes en todos los resultados. Los valores de la velocidad de rotación han sido mantenidos en el rango $\Omega \in [0, 8]$ aunque los principales resultados que mostramos están en la región $\Omega \in [0, 4.6]$. en esta región los valores del número de Rayleigh han sido variados hasta encontrar los puntos de las bifurcaciones primarias.

De los resultados obtenidos podemos concluir los siguientes aspectos:

- En el sistema de referencia de laboratorio el flujo básico obtenido son soluciones estacionarias, en las cuales los valores máximos de la desviación de la temperatura Θ y la velocidad axial w están desplazados (con respecto al caso $\Omega = 0$) un ángulo tanto mayor cuanto mayor es la velocidad angular impuesta en las paredes. Los valores máximos del flujo transversal que para $\Omega = 0$ se encontraba en puntos cercanos al centro del cilindro, se van desplazando hacia el contorno circular a medida que aumenta la velocidad de rotación.

- Para los valores de Ω y números de Rayleigh Ra estudiados existe una competencia entre el efecto térmico, debido a la convección natural y el efecto de la rotación del cilindro. A medida que aumenta la velocidad angular aplicada al cilindro disminuye la energía cinética total debido a la disminución de la componente axial de la velocidad. Esto se observa claramente en la Figura 4.8 a), donde observamos un punto de inflexión en que ambos efectos intercambian su prevalencia.
- El efecto de la rotación en valores bajos de Ω es destruir la simetría con respecto al plano vertical L_v y forzar al fluido al movimiento en el sentido de la dirección impuesta.
- Para valores altos de Ω todo el fluido rota con un movimiento cercano a un movimiento de cuerpo rígido junto con las paredes del cilindro.
- El movimiento convectivo provocado por los efectos térmicos se desacelera a medida que aumenta Ω y por consiguiente la transferencia de calor por convección se reduce en favor de un estado conductivo puro según se puede observar en el comportamiento del número de Nusselt tendiendo a la unidad.
- En el espacio de parámetros estudiados observamos un complejo diagrama de bifurcaciones en el que existen varias bifurcaciones de codimensión 2 muy cercanas. Hay una extensa región en el diagrama de bifurcaciones donde el estado básico posee múltiples soluciones, es decir, existen varias ramas de soluciones; una que comienza en valores de Rayleigh pequeños y otras que nacen en puntos de nodo *saddle*.

Capítulo 5

Medidas de coeficientes de difusión.

5.1. Introducción

Conocer los datos exactos de coeficientes de difusión de materiales tales como metales y semiconductores es de gran importancia en los procesos de crecimientos de cristales y en el control óptimo de procesos de fundición de metales en condiciones terrestres. Estos coeficientes, que pueden ser obtenidos a través de rigurosos experimentos con líquidos de un solo componente o con mezclas de dos componentes, dependen de la posición, la temperatura y del gradiente de concentración. En general, el coeficiente de difusión de un componente individual de una mezcla multicomponente está relacionado con el desplazamiento cuadrático medio de partículas, mientras que los coeficientes de interdifusión están relacionados con el transporte colectivo de masa manejado por gradientes de concentración [Meyer and Kargl, 2013]. A su vez, mediante la ecuación de Darken, podemos aproximar el coeficiente interdifusión de una mezcla de dos componentes A y B por una combinación lineal de los coeficientes de difusión individuales de cada componente [Zhang et al., 2009]. De procesos de difusión en aleaciones binarias con gradientes de composición se obtienen también los coeficientes de interdifusión de la mezcla. En este capítulo nos centraremos en los coeficientes de interdifusión de mezclas binarias.

En los procedimientos experimentales típicos para medir dichos coeficientes se utilizan capilares, es decir, tubos cilíndricos hechos generalmente de grafito [Müller-Vogt and Koeçler, 1998], cuyos diámetros son hasta 40 veces menores que sus longitudes para dificultar el transporte convectivo [Mathiak et al., 1996]. Los diámetros típicos son de 1 a 3 mm. Diámetros menores a 1 mm no son recomendables porque pueden frenar la difusión por el efecto de las paredes en el proceso [Müller and Müller-Vogt, 2003]. Durante el experimento se introduce una mezcla con dos diferentes concentraciones en cada una de las mitades del capilar que inicialmente no están en contacto. Este capilar se introduce en cámaras que lo mantiene a muy altas temperaturas ($\approx 1000^\circ\text{C}$) durante horas hasta lograr que la temperatura sea homogénea en toda la mezcla. El proceso comienza juntando las dos mitades y se deja que la mezcla difunda durante cierto período de tiempo. Se determina el perfil de concentración a lo largo del eje del capilar z y se compara con

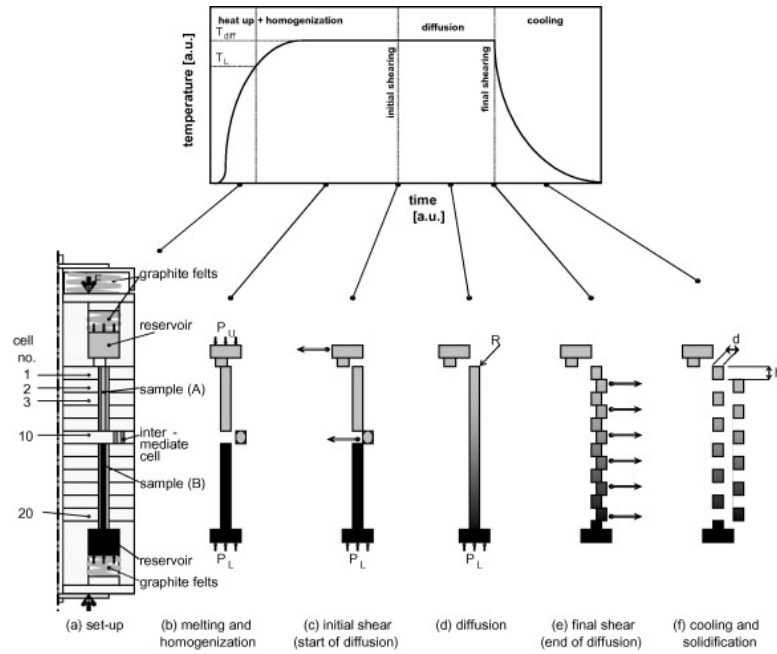


Figura 5.1: Dispositivo utilizada en el experimento de difusión en la misión **FOTON** llevada a cabo por la Universidad Técnica de Berlín, donde se emplean las técnicas de capilar largo (L.C.) y *shear cells* combinados [Roşu-Pflumma et al., 2009].

la solución analítica obtenida a partir de la Segunda Ley de Fick: $\partial_t C(z, t) = D \nabla^2 C(z, t)$, donde D es el coeficiente de difusión y $C(z, t)$ la concentración de la muestra, z es la posición y t el tiempo [Bergman et al., 2002, Roşu-Pflumma et al., 2009, Müller and Müller-Vogt, 2003]

En algunos experimentos [Zhang et al., 2010, Griesche et al., 2010] se monitoriza *in situ* este proceso en función del tiempo tomando radiografías por rayos X en las que se observan las diferencias de concentración a lo largo de la dirección axial del capilar. En caso de materiales donde haya poco contraste por rayos X se utiliza la técnica radiográfica de neutrones [Takaia et al., 1999]. De estas radiografías se extrae el perfil de concentración deseado. En ocasiones no se pueden tomar radiografías por las condiciones del experimento. Sólo se puede obtener la concentración de las mezclas *post mortem*. Esto trae como inconveniente que durante el enfriamiento haya un fuerte flujo convectivo dentro del fluido por los gradientes térmicos en dirección radial. Para minimizar este efecto se usa una versión avanzada del capilar largo, el método de *shear cells* o S.C.. Este método consiste en capilares largos divididos en pequeñas porciones cilíndricas de igual tamaño, donde cada una puede desplazarse perpendicularmente al eje. En la Figura 5.1 se muestra un dispositivo que combina un capilar largo y una *shear cells*. Este dispositivo ha sido usado en los experimentos terrestres y de microgravedad llevados a cabo por la misión aeroespacial FOTON de la Universidad Técnica de Berlín [Roşu-Pflumma et al., 2009].

En condiciones terrestres suele haber contaminación de los resultados por la convección generada por las diferencias de concentración dentro del fluido. Estas perturbaciones convectivas provocan dispersión en los resultados medidos. Con frecuencia los datos publicados de coeficientes de

difusión de metales líquidos pueden variar entre un 50 % y 100 %, por lo que aún se carece de fuentes de datos exactos y consistentes. Este problema se resuelve en gran medida utilizando las condiciones de microgravedad de la Estación Espacial Internacional (ISS, por sus siglas en inglés) o en vuelos de cohetes espaciales, pero aún quedan pequeñas variaciones entre datos que es necesario estudiar con detalle.

En estudios realizados por Itami et al. [2002] comparando datos de coeficientes de difusión de un isótopo de estaño (^{124}Sn) usado como trazador en Sn (estaño líquido natural) realizados en experimentos terrestres con los realizados en microgravedad, se utilizó un capilar largo de grafito y se analizó la muestra para diferentes temperaturas con técnicas de espectroscopía de masa (**Secondary ion mass spectrometry**). Se concluyó que dichos coeficientes en condiciones microgravitatorias fueron mucho más pequeños y con más estrecha banda de dispersión estadística para el mismo rango de temperaturas. En la Figura 5.2 se muestra esta diferencia: (a) son los coeficientes de difusión medidos para estaño líquido (Sn) a diferentes temperaturas realizados por el autor (con un círculo negro) y por otros autores en laboratorios en microgravedad; (b) son los coeficientes de difusión medidos para estaño líquido (Sn) a diferentes temperaturas realizados por varios autores en laboratorios terrestres.

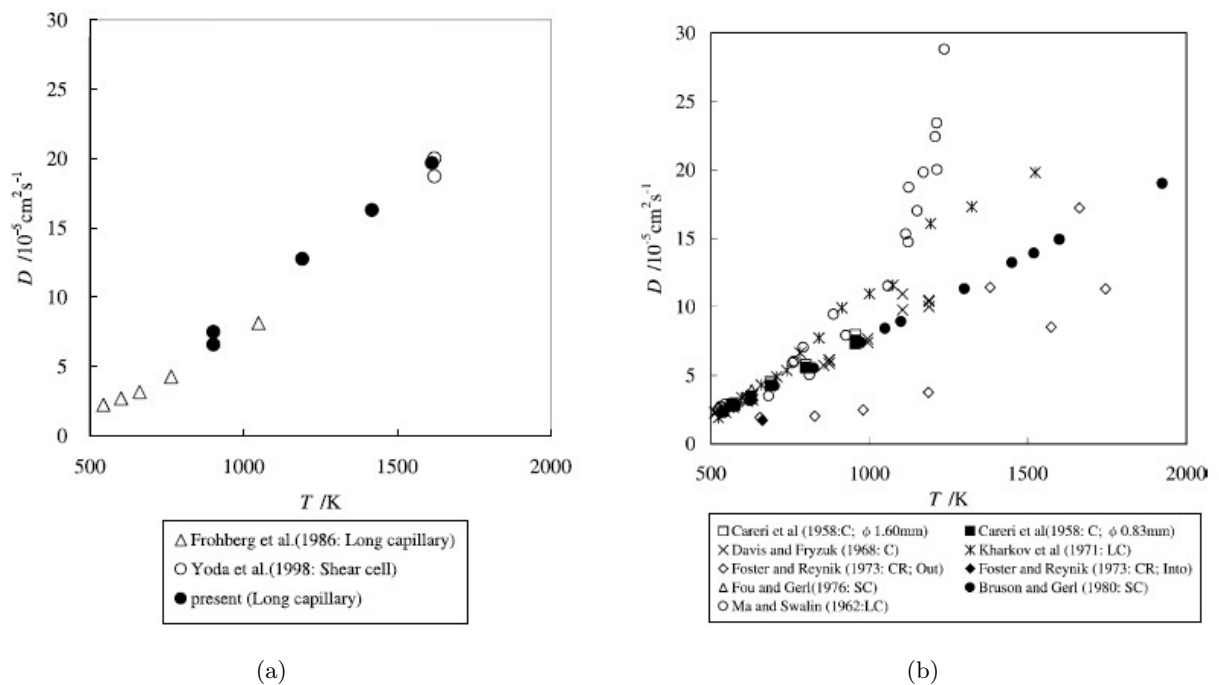


Figura 5.2: Coeficientes de difusión de Sn líquido en función de la temperatura obtenidos en: (a) Experimentos en microgravedad realizados por el autor (con un círculo negro) y por otros autores (b) Experimentos terrestres medidos por varios autores con distintos métodos experimentales. (Imágenes tomadas de Itami et al. [2002])

Aunque muchos de estos experimentos se realicen en condiciones de microgravedad en la ISS, no están libres de perturbaciones y accidentes [Tryggvason et al., 2001, Savino and Paterna, 2002]. Los movimientos generados por las oscilaciones de cuerpo rígido alrededor del centro de masa de

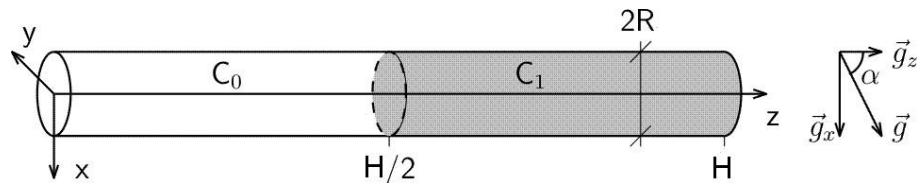


Figura 5.3: Esquema del capilar con la disposición de las dos concentraciones iniciales. $\alpha = 90$ grados si el vector fuerza de gravedad es paralelo al eje x.

la ISS, el efecto de las vibraciones o g-jitter, así como la influencia de las deformaciones elásticas de la estructura de la estación produce diferentes efectos en el comportamiento de los líquidos en los experimentos de difusión.

Los experimentos realizados en los vuelos de las naves FOTON-11 y FOTON-12 tampoco están libres de efectos adversos. El movimiento complejo de estas naves está caracterizado por una rotación lenta alrededor de su eje de simetría que provocan aceleraciones cuasiestacionarias (μg) y que inducen movimientos convectivos en los líquidos de experimentos a bordo [Savino and Paterna, 2002].

Las condiciones de baja gravedad son más favorables que las terrestres para determinar experimentalmente propiedades físicas de aleaciones y cristales semiconductores, incluso se producen cantidades limitadas de materiales de alta calidad en laboratorios en microgravedad para que sirvan de referencia a futuros materiales. Entre ellos, tienen gran interés los compuestos de silicio multicristalino y aleaciones de aluminio. El silicio multicristalino es uno de los materiales más usados en la industria fotovoltaica por su bajo coste de producción y su alta eficiencia de conversión en celdas solares [Gao et al., 2010]. Las aleaciones y compuestos conteniendo aluminio se utilizan en múltiples aplicaciones industriales. El comportamiento de la solidificación de dichas aleaciones son sensibles a las condiciones de gravedad en los que se lleve a cabo el proceso [Luo et al., 2003].

Centraremos nuestra atención en estudiar el error en la determinación de los coeficientes de difusión de materiales con propiedades físicas comparables a metales líquidos y semiconductores simulando experimentos en microgravedad.

5.2. Objetivos del capítulo

El objetivo de este capítulo de tesis es valorar la influencia de los bajos niveles de gravedad, así como el efecto de la inclinación y la rotación del capilar, las oscilaciones del campo gravitatorio y la influencia de señales acelerométricas reales en las medidas de los coeficientes de difusión de una mezcla con propiedades similares a las de los metales líquidos y semiconductores. Para eso simularemos un experimento de difusión en un capilar largo (de ahora en adelante nos referiremos a este método por las siglas LC) conteniendo una mezcla binaria (ver Figura 5.3). La mezcla binaria tendrá dos concentraciones situadas inicialmente en cada mitad del capilar,

cuyo parámetro de forma es $\Gamma = 40$. Este valor equivale, por ejemplo, a tomar un capilar de 0.15 cm de diámetro y 6 cm de largo. En la Tabla 5.1 mostramos los valores típicos de propiedades termofísicas de materiales que emplearemos en nuestras simulaciones: semiconductores como el silicio [Liu et al., 2006, Garandet, 2007] y aleaciones metálicas conteniendo aluminio [Garandet et al., 2004].

Material	H(cm)	2R(cm)	$D(\text{cm}^2/\text{s})$	$\nu(\text{cm}^2/\text{s})$	Sc	$10^2 \beta_c \Delta C$	$10^3 Ra(g = 1\mu g)$	$\tau(s)$
Semiconductor (Si)	6	0.15	1×10^{-4}	3×10^{-3}	30	0.5	55.1	225
Al. metálicas (Al)	6	0.15	0.2×10^{-4}	3×10^{-3}	150	-1	551	1125

TABLA 5.1: Parámetros geométricos del capilar y propiedades termofísicas típicas de fluidos binarios usados en nuestros experimentos numéricos. El parámetro $\tau(s)$ es el tiempo característico calculado a partir de $\frac{(2R)^2}{D}$

Los resultados de las simulaciones numéricas del problema, donde se tendrá en cuenta la transferencia de masa por difusión y convección, se compararán con el modelo teórico obtenido para un proceso difusivo puro unidimensional descrito por la Ley de Fick. Para la modelización emplearemos las ecuaciones de transporte (2.6) en un dominio cilíndrico, donde la orientación α entre su eje axial y el vector de gravedad será variable. Se compararán los resultados obtenidos con simulaciones de experimentos usando *shear cells* (SC) empleando el método de volúmenes finitos descrito en [Pallarés et al., 2002]. Compararemos también nuestros resultados con las simulaciones de un caso bidimensional de la literatura [Ruiz et al., 2010, Ruiz and Pallarés, 2012].

5.3. Procedimiento y selección de número de puntos de malla

El sistema de ecuaciones (2.6) para modelar la técnica LC es resuelto numéricamente con los algoritmos descritos en Sec. 2.2 con las condiciones de contorno e iniciales Sec. 2.1.5 para un capilar de parámetro de forma $\Gamma = 40$. La condición inicial en (2.8)

$$C(r, \theta, z, 0) = 0.5 \tanh\left(\delta \left[\frac{2z}{\Gamma} - 1\right]\right) \quad z \in [0, \Gamma]$$

evita que haya una discontinuidad abrupta entre las concentraciones en las dos mitades del cilindro. El parámetro δ han sido ajustado según el número de puntos de discretización y será detallado más adelante.

El postprocesamiento es el siguiente: en cada paso de tiempo los valores de la concentración $C(r, \theta, z, t)$ en cada punto de colocación a lo largo del eje z son promediados $\bar{C}(z, t)$ en el plano transversal al eje. Con estos valores conformamos un perfil discreto de pares de valores de posición y concentración $(z_i, \bar{C}_i(z, t))$, $(i = 1, \dots, K + 1)$ y lo ajustamos a la solución analítica minimizando el error cuadrático medio. La solución analítica unidimensional es la siguiente:

$$\tilde{C}(z', t') = -\frac{1}{2} \operatorname{erf} \left(-\frac{z'}{2\sqrt{D t'}} \right), \quad z' \in (-\infty, \infty) \quad (5.1)$$

donde erf representa la función error. Aproximamos esta solución (5.2) considerando un dominio de dimensión finita dado por $z' = z \frac{H}{2}$, donde $z \in [-1, 1]$, con un coeficiente de difusión “aparente” D^*

$$\tilde{C}(z', t') = -\frac{1}{2} \text{erf} \left(-\frac{z'}{2\sqrt{D^* t'}} \right), \quad z' \in \left(-\frac{H}{2}, \frac{H}{2} \right) \quad (5.2)$$

Si utilizamos un tiempo adimensionalizado $t = t' \cdot D / (2R)^2$, obtenemos la expresión

$$\tilde{C}(z, t) = -\frac{1}{2} \text{erf}(-z s), \quad z \in [-1, 1] \quad (5.3)$$

donde $s = \frac{\Gamma}{4} \left\{ \frac{D^*(t)}{D} \cdot t \right\}^{-1/2}$ es una constante cuyo valor se determina en cada ajuste al perfil numérico $(z_i, \tilde{C}_i(z, t))$.

Para aplicar esta solución (5.2) de un dominio infinito a uno finito debemos evitar que la perturbación llegue a los extremos del cilindro o al menos que tenga la mínima influencia. Por eso cuando la concentración promediada en las tapas del cilindro ha variado más de un 1 % del valor inicial, detenemos el cálculo y tomamos este tiempo final como $t = t_{\text{end}}$ y el perfil numérico en ese instante $(z_i, \tilde{C}_i(z, t_{\text{end}}))$. Este valor del 1 % es el error permitido en las medidas de concentraciones promedios en fragmentos sólidos mediante las técnicas usuales de análisis de espectros atómicos [Ruiz et al., 2010, Ruiz and Pallarés, 2012].

Despejando el cociente $\frac{D^*(t)}{D}$, se calcula el indicador adimensional $\%D^*(t)$ que nos evalúa el porcentaje de error que introduce la convección solutal y viene dado por la expresión

$$\%D^*(t) = 100 \% \left\{ \frac{D^*(t)}{D} - 1 \right\} \quad (t = t_{\text{end}}) \quad (5.4)$$

De la misma forma calculamos un indicador adimensional para el caso puramente difusivo $D_{\text{dif}}^*(t)$ que corresponde a la posición estable del cilindro $\alpha = 0$ (ver Figura 5.3) en que el gradiente de concentración y el vector de gravedad \mathbf{g} son paralelos y en el mismo sentido.

$$\%D_{\text{dif}}^*(t) = 100 \% \left\{ \frac{D_{\text{dif}}^*(t)}{D} - 1 \right\} \quad (t = t_{\text{end}}) \quad (5.5)$$

Este valor $\%D_{\text{dif}}^*(t)$ es distinto de cero y es inherente a la metodología numérica usada. Por eso usaremos en cada caso un indicador corregido final dado por

$$\%D = \%D^*(t) - \%D_{\text{dif}}^*(t) \quad (t = t_{\text{end}}) \quad (5.6)$$

5.3.1. Parámetro δ

El valor óptimo del parámetro δ en (2.8) depende del número de puntos seleccionados en la dirección z , es decir el valor de K usado para discretizar. Para buscar los valores óptimos de N , M y K (números de puntos del polinomio de Chebyshev en r , número de modos de Fourier en θ y números de puntos del polinomio de Chebyshev en z) y el parámetro δ se realizaron varias

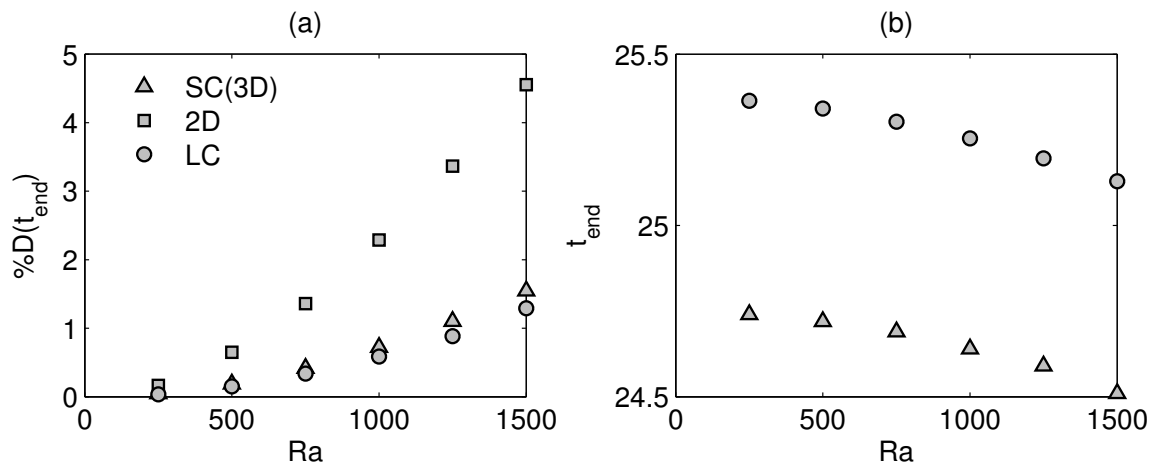


Figura 5.4: Variación de a) $\%D(t_{end})$ y b) t_{end} en función del número de Rayleigh solutal para SC (triángulos) y LC (círculos). Los cuadrados corresponden a los resultados 2D de $\%D(t_{end})$ en un dominio rectangular [Ruiz et al., 2010]. El vector de gravedad actúa ortogonalmente al gradiente de concentración ($\alpha = 90^\circ$).

pruebas numéricas para estimar el valor del $\%D$ en función de número de puntos. Los resultados de estas pruebas de convergencia dieron como valores adecuados una malla de $N = 42$, $M = 20$, $K = 301$ y $\delta = 300$, mostrando un error máximo de 0.07% en todos los casos con mallas mucho más finas. El paso de tiempo en los cálculos fue seleccionado como $\Delta t = 1 \times 10^{-3}$.

5.4. Resultados

5.4.1. $\%D$ en función de número de Rayleigh para $\alpha = 90^\circ$ ($\mathbf{g} = g_x \mathbf{i}$)

En este primer caso mostramos en la Figura 5.4 los resultados de $\%D$ manteniendo el capilar en posición ortogonal a \mathbf{g} ($\alpha = 90^\circ$) y variando el número de Rayleigh desde 250 hasta 1500.

Los resultados para los dos distintos valores del número de Schmidt que aparecen en la Tabla 5.1 no muestran apenas diferencia, por lo que sólo mostraremos resultados para $Sc = 150$ en todo este capítulo. Los resultados 2D [Ruiz et al., 2010, Ruiz and Pallarés, 2012] que se muestran corresponden a un parámetro del mismo valor, número de celdas igual a 20 y valores de parámetros físicos iguales a los que hemos usado aquí. Se observa en la Figura 5.4 a) que los resultados para $\%D(t_{end})$ en 2D son mayores que los de 3D. Esto nos indica, como era de esperar, que la presencia de paredes introduce fricciones que provocan pérdidas de energía cinética y hacen que el movimiento convectivo producido por la interacción entre el gradiente de densidad y la gravedad ortogonal sea menos intenso.

Comparando los resultados 3D de la técnica LC con los resultados 3D usando la técnica SC [Sánchez et al., 2015], observamos que los tiempos finales t_{end} (ver Figura 5.4 b) son diferentes, siendo menores para SC; en cambio el error $\%D(t_{end})$ se hace mayor en SC con respecto a

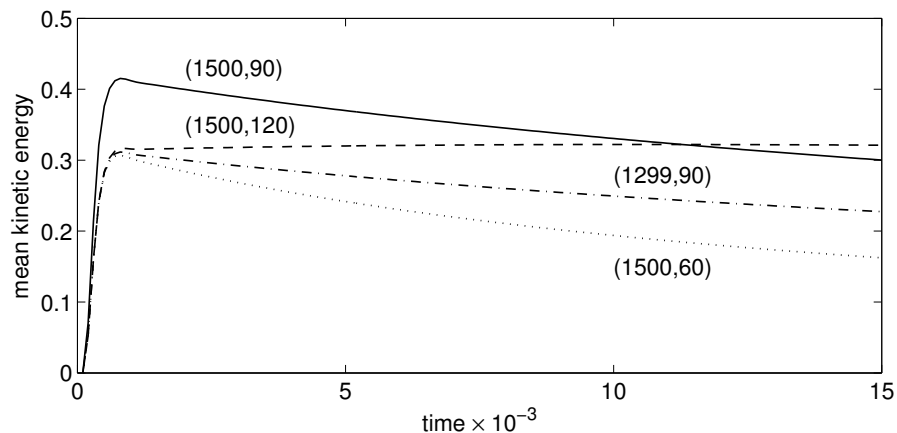


Figura 5.5: Evolución temporal de la energía cinética media en el capilar en instantes iniciales del proceso de difusión. Tres pares valores del número de Rayleigh con igual componente x ($Ra_x = 1299$) y orientación α han sido seleccionados: (1500,60), (1299,90) y (1500,120). El cuarto valor $Ra = 1500$ y $\alpha = 90$ ha sido añadido a modo de comparación (ver vectores en Figura 5.6).

LC a medida que aumenta el número de Rayleigh, llegando a tener una diferencia de 0.25 en $Ra = 1500$.

En la Figura 5.4 a) observamos como la curva $\%D(t_{end})$ en 2D cruza el umbral del 1 % en un número de Rayleigh cercano a 625 mientras que este mismo límite está en un Rayleigh de 1250 para los casos 3D. En términos de valores de gravedad este límite realista está en 1 mg , lo cual da un margen mayor de seguridad en experimentos donde el capilar esté dispuesto ortogonalmente, mostrando menor sensibilidad en niveles menores de gravedad.

5.4.2. $\%D(t_{end})$ en función de las variaciones del vector de gravedad $\mathbf{g} = g_x \hat{\mathbf{x}} + g_z \hat{\mathbf{z}}$ con respecto al gradiente de densidad inicial

En experimentos de corto tiempo realizados en vuelos parabólicos como en la misión FOTON-M2 [Roşu-Pflumma et al., 2009] resulta relevante determinar el valor de $\%D(t_{end})$ según la orientación relativa entre el vector de gravedad y el gradiente de densidad inicial (ver Figura 5.3). Para un vector de gravedad con componentes en x y z

$$\mathbf{g} = g_x \hat{\mathbf{x}} + g_z \hat{\mathbf{z}}$$

el número de Rayleigh en (2.6) será una cantidad vectorial dada por

$$\mathbf{Ra} = Ra_x \hat{\mathbf{x}} + Ra_z \hat{\mathbf{z}}$$

Inicialmente la perturbación convectiva es producida sólo por la interacción entre el perfil de concentración $C(z, 0)$ y la componente g_x del vector de gravedad. Posteriormente esta perturbación

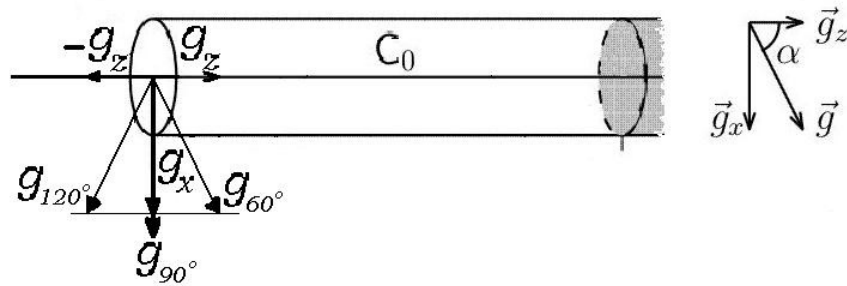


Figura 5.6: Disposición de los componentes x y z del vector de gravedad según los ángulos 60° , 90° y 120° .

interactúa con la componente g_z pero esta interacción tendrá un efecto distinto en dependencia del signo de g_z (ver Figura 5.6).

Se presentan los tres casos siguientes

- $g_z > 0$ ($\alpha < 90^\circ$) la perturbación inicial es amortiguada favoreciendo el proceso difusivo puro.
- $g_z < 0$ ($\alpha > 90^\circ$) la perturbación inicial es aumentada contaminando el proceso difusivo con transporte convectivo.

Los efectos no lineales secundarios dependen de ambas componentes del vector de Rayleigh y consecuentemente en ambas componentes del vector de gravedad \mathbf{g} . Este efecto es claramente mostrado en la Figura 5.5 donde se ha representado la evolución temporal de la energía cinética media en todo el capilar para los instantes iniciales. En este cálculo se ha tenido que reducir el paso de tiempo a $\Delta t = 1 \times 10^{-4}$ para poder capturar los detalles de la evolución de la energía en los instantes iniciales. Hemos seleccionado tres pares de valores de número de Rayleigh y la orientación (Ra, α) , en los que el valor de la componente x del número de Rayleigh permanece constante $Ra_x \approx 1299$ (ver los vectores en la Figura 5.6): $(1500, 60^\circ)$, $(1500, 120^\circ)$, $(1299, 90^\circ)$, cuyas curvas de energía cinética media están representadas con líneas discontinuas en la Figura 5.5. En estos tres casos la perturbación inicial es la misma pero la interacción posterior manejada por la componente z , es decir, Ra_z es diferente. En el caso $g_z < 0$ ($\alpha > 90^\circ$) donde la perturbación es intensificada, los efectos secundarios no lineales pueden llegar a sobrepasar el impulso inicial. Esto es lo que sucede con $(1500, 120^\circ)$ con respecto a $(1500, 90^\circ)$, donde la interacción con la componente z favorece la perturbación.

En la Figura 5.7 se muestra $\%D(t_{end})$ en función de la orientación α para diferentes valores del número de Rayleigh solutal Ra y número de Schmidt $Sc = 150$ (los valores para $Sc = 30$ coinciden). Observamos que, según la anterior discusión, el error relativo es asimétrico con respecto a la posición ortogonal y esta asimetría puede ser aún mayor para valores de Rayleigh mayores a 1500. Para $Ra = 250$ el valor máximo está muy cerca de $\alpha = 90^\circ$, pero esta posición del valor máximo se desvía hacia $\alpha = 180^\circ$ para valores de Rayleigh mayores. Los valores del indicador en $\alpha = 180^\circ$ son prácticamente cero, producto de que el número de Rayleigh basado

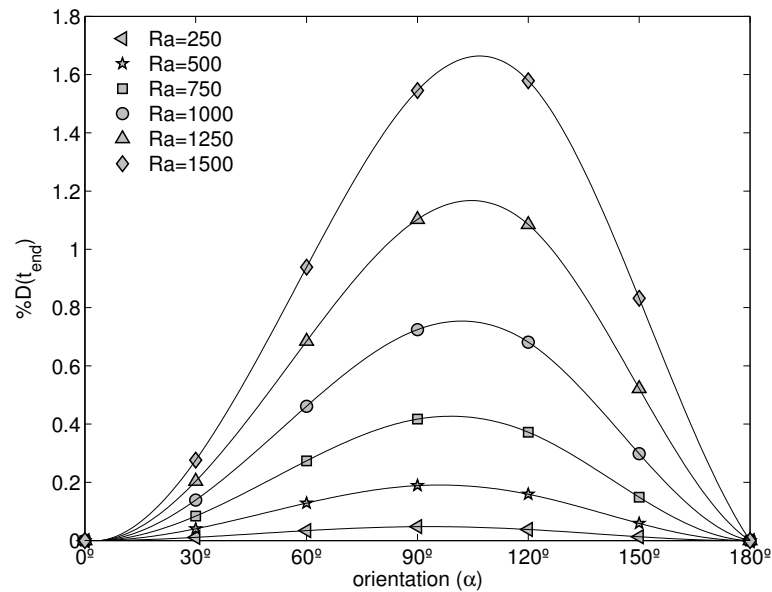


Figura 5.7: Variación de $\%D(t_{end})$ en función de la orientación relativa α para diferentes números de Rayleigh. Las líneas sólidas son curvas de interpolación por spline de los datos.

en la longitud de la capa de difusión está por debajo del valor crítico de Rayleigh para iniciar alguna perturbación convectiva. En el otro extremo $\alpha = 0^\circ$, los valores de $\%D(t_{end})$ son cero de acuerdo a la definición (5.6).

5.4.3. $\%D(t_{end})$ según la frecuencia de vibraciones gravitatorias $\mathbf{g} = g_x(t)\mathbf{i} = A\cos(2\pi ft)\mathbf{i}$

Muchos investigadores han estudiado el impacto de oscilaciones de cuerpo rígido alrededor del centro de masa y/o deformaciones elásticas de la estructura de la ISS en el comportamiento de los fluidos en experimentos a bordo [Savino and Paterna, 2002]. Esto ha permitido valorar la influencia de dichas oscilaciones en los resultados experimentales. En [Yan et al., 2005] se estudia la presencia tanto de una microgravedad estática como oscilatoria en experimentos de difusión para frecuencias entre 1 y 25 mHz, y se concluye que las vibraciones de baja frecuencia provocan un efecto más perjudicial que las de alta frecuencia. Aquí sólo analizaremos el modelo ideal más simple en el cual la gravedad es una función armónica del tiempo dada por $g(t) = A\cos(2\pi ft)$ aplicada a lo largo del eje x , es decir, ortogonalmente al gradiente de densidad inicial generado por el perfil escalón de concentración. El rango de frecuencias que exploraremos estará entre 0 y 9, el mismo rango usado en [Ruiz et al., 2010]. Expresando este rango de frecuencias a valores con dimensiones con el tiempo característico tenemos que para aleaciones de aluminio $\tau = 1125s$ (Tabla 5.1) corresponde a un rango de frecuencias de $[0, 8]$ mHz mientras que para semiconductores $\tau = 225s$ el rango de frecuencias es $[0, 40]$ mHz.

En la Figura 5.8(a) se muestra los valores de $\%D(t_{end})$ en función de la frecuencia f externa aplicada para dos valores de Rayleigh 1500 y 3000, evaluado usando la máxima amplitud de la gravedad A con el método LC.

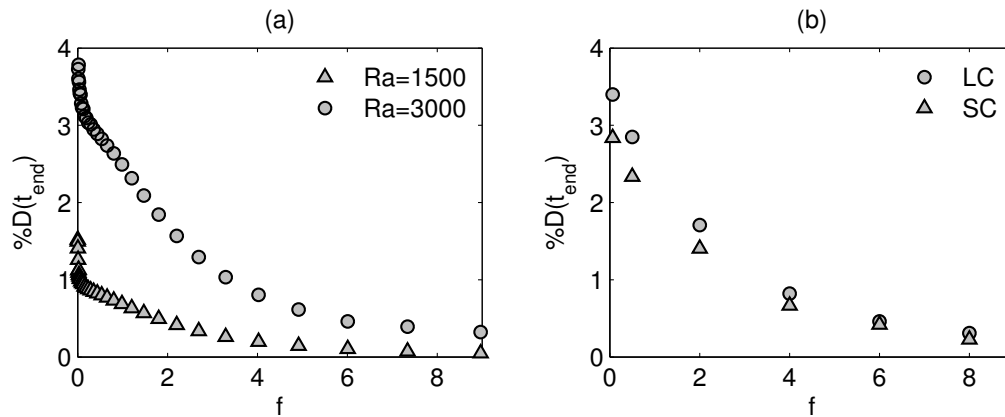


Figura 5.8: (a) Variación de $\%D(t_{end})$ en función de la frecuencia armónica externa aplicada para dos valores de Rayleigh diferentes: $Ra = 1500$ (triángulos) y $Ra = 3000$ (círculos) y $\alpha = 90^\circ$. (b) Los valores de $\%D(t_{end})$ para las dos diferentes técnicas experimentales: SC con 20 celdas (triángulos) y LC (círculos) y $Ra = 3000$

Para muy bajas frecuencias, en las que el t_{end} es mucho menor que el período de la señal aplicada, observamos que $\%D(t_{end})$ decrece rápidamente. Tomando como referencia el valor de $t_{end} = 25.13$ dado en la Figura 5.4 para $Ra = 1500$, los valores de los períodos de señal menores a este valor estarían en el rango aproximado de frecuencias adimensionales entre 0 y 0.04.

Cuando el t_{end} es mayor que el período de la oscilación, vemos un cambio en la pendiente de la curva y el decrecimiento es mucho más suave. Basado en este comportamiento podríamos concluir que la perturbación convectiva se debe a la componente continua de la señal gravitatoria [Savino and Paterna, 2002], que es lo que en [Yan et al., 2005] le llaman *gravedad residual estática*. Si eliminamos esta parte continua y para frecuencias suficientemente altas las fluctuaciones no afectarán apenas la medida del coeficiente de difusión.

En la Figura 5.8(b) se muestra una comparación de los resultados de las dos técnicas, LC y SC, para $Ra = 3000$ que corrobora las conclusiones ya explicadas en la Figura 5.8(a). Podemos observar que los resultados son más similares para altas frecuencias que para bajas, donde el tiempo de parada influye más en el resultado.

En las instalaciones donde se llevan a cabo experimentos en microgravedad se instalan sistemas de amortiguamiento de vibraciones pero el rango de frecuencias amortiguadas están en escalas altas es decir el rango comprendido entre 0.1 y 300 Hz. En [Tryggvason et al., 2001] se estudia la sensibilidad a vibraciones en el rango de frecuencia entre 1 y 100 Hz de distintos experimentos realizados en la estación espacial MIR, con y sin sistema de amortiguamiento de vibraciones y se concluye que aún queda mucho trabajo para esclarecer la influencia de vibraciones en los experimentos de difusión.

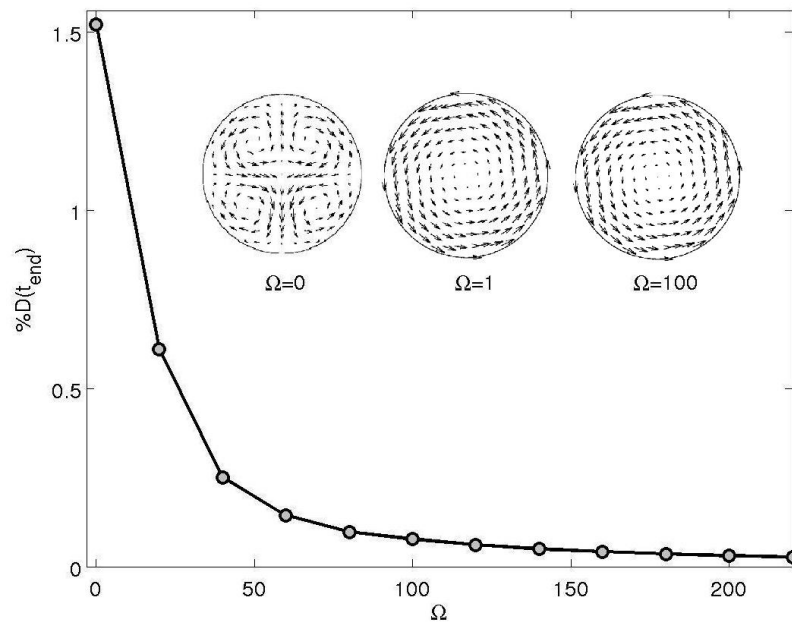


Figura 5.9: $\%D(t_{end})$ para diferentes velocidades angulares $\Omega = 0, 1, 100$, número de Rayleigh $Ra = 1500$ y $\alpha = 90^\circ$. Las imágenes insertadas corresponden al campo de velocidad transversal en uno de los planos centrales del cilindro, aunque la longitud de las flechas en cada caso corresponde a diferente amplitud. El flujo ya es dominado por la rotación para pequeños valores de Ω

5.4.4. $\%D(t_{end})$ según la velocidad angular Ω .

En esta sección analizaremos cómo la rotación axial del capilar afecta la medida del coeficiente de difusión. Para eso hemos cambiado la condición de contorno de velocidad homogénea en (2.7) por

$$(u, v, w, \Theta) = (0, \Omega r, 0, 0) \quad \text{en} \quad \delta\Sigma \quad (5.7)$$

donde Ω es una velocidad angular adimensional y constante aplicada a todo el contorno del cilindro. El sentido de dicha velocidad no es importante ya que el sistema de ecuaciones junto con las condiciones iniciales y de contorno poseen la simetría siguiente: Si $(u, v, w, \Theta)(r, \theta, z)$ es una solución del problema para Ω , entonces $(u, -v, w, \Theta)(r, \theta, z)$ es una solución del problema para $-\Omega$. Esta simetría implica que el proceso de medición no está afectado por el sentido de la rotación.

Los resultados, que se muestran en la Figura 5.9, han sido calculados para un valor único de Rayleigh $Ra = 1500$ y manteniendo el campo gravitatorio ortogonal al gradiente de concentración inicial. La velocidad angular de $\Omega = 200$ en la Figura 5.9 en valores reales corresponde a $\sim 6 \text{ rad/s}$ para compuestos conteniendo silicio y $\sim 1 \text{ rad/s}$ para aleaciones de aluminio. En las figuras insertadas en la Figura 5.9 mostramos el campo de velocidad transversal en un plano cercano al centro $z = \Gamma/2$ para el caso sin rotación $\Omega = 0$ y con rotación $\Omega = 1$ y $\Omega = 100$ para $t = t_{end}$. Observamos que ya en $\Omega = 1$ el flujo es dominado por la rotación axial del capilar.

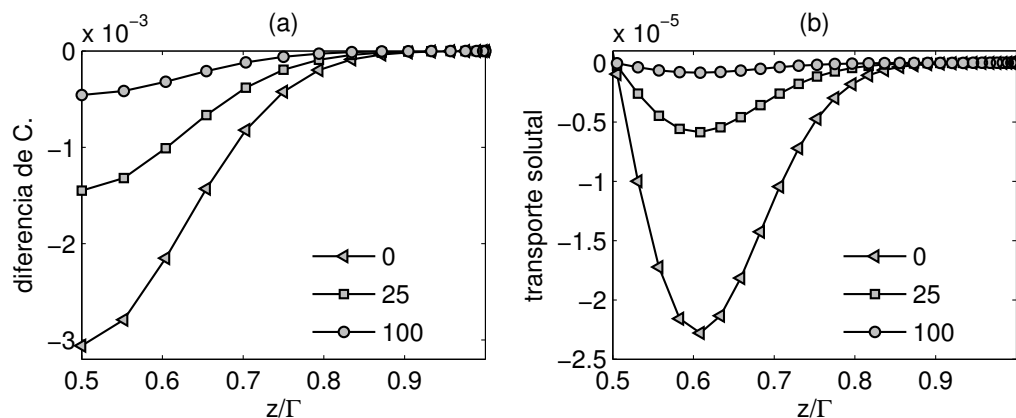


Figura 5.10: (a) Diferencia de concentración en t_{end} en diferentes planos $z = const.$ para $\Omega = 0$ (triángulos), $\Omega = 25$ (cuadrados) y $\Omega = 100$ (círculos). Las variaciones de la concentración decrecen significativamente cuando la velocidad de rotación aumenta. (b) Transporte solutal axial medio en los planos $z = const.$ para los mismos valores de Ω .

La Figura 5.9 muestra claramente el decrecimiento significativo de $\%D(t_{end})$ cuando se incrementa la velocidad angular, lo cual nos indica que la rotación del fluido influye de forma decisiva en el flujo convectivo. Para entender mejor el mecanismo que permite este comportamiento, hemos representado en la Figura 5.10(a) la diferencia entre máxima y mínima concentración, en cada plano perpendicular al eje del cilindro desde el centro $z = \Gamma/2$ hasta el final $z = \Gamma$ correspondiente al estado final de la evolución temporal t_{end} . Las máximas diferencias se encuentran en los planos cercanos al centro donde está situado el escalón inicial de concentración. A medida que se incrementa la velocidad angular esta diferencia se reduce. Esto se debe al efecto de mezcla inducido por la circulación azimuthal del fluido.

A modo de esclarecer aún más el comportamiento del fluido bajo los efectos de la rotación mostramos en la Figura 5.10(b) el transporte solutal convectivo axial promedio $\langle w \partial_z C \rangle$, donde z es evaluada en cada punto de colocación z_k , ($k = 1, \dots, K + 1$). Este término nos permite analizar el "arrastré" solutal en la dirección z por la componente axial de la velocidad. Según se interpreta de esta figura la disminución del transporte solutal no es consecuencia de la reducción de la velocidad axial la cual es apenas afectada por la rotación, sino que es consecuencia de la homogenización de la concentración. El efecto de esta homogenización transversal trae como consecuencia la reducción del transporte solutal axial como se muestra en dicha figura.

5.4.5. Implicaciones para los experimentos de difusión realizados en la Estación Espacial Internacional. Determinación de $\%D$ en función de un número de Rayleigh vectorial $\mathbf{Ra} = Ra_x \mathbf{i} + Ra_y \mathbf{j} + Ra_z \mathbf{k}$

Una de las tareas principales de la ISS y naves espaciales es llevar a cabo experimentos científicos en diferentes ramas de la ciencia entre ellas la de ciencia de materiales y fluidos. Las fuerzas convectivas en dichas instalaciones son reducidas en un factor de 10^6 comparadas a las de la Tierra. Sin embargo existen pequeñas perturbaciones acelerométricas a bordo que imitan el efecto

de gravedad [Tryggvason et al., 2001, Savino and Paterna, 2002, Kelly, 2004]. Esto conlleva a que se haga necesario cuantificar el impacto de estos fenómenos indeseados en los experimentos que allí se lleven a cabo. A continuación describiremos algunas de estas fuentes de perturbación. La estación espacial internacional (ISS), la estructura más grande y compleja construida hasta la fecha que orbita alrededor de la Tierra, experimenta un decaimiento orbital de aproximadamente 150 m por día. Para corregir esto se realizan operaciones de reinicio periódico para impulsar toda la estructura a la órbita inicial. El ajuste orbital continuo (OA por sus siglas en inglés) se hace en intervalos de entre 10 y 80 días

La ISS se conecta eficientemente a naves y módulos con el objetivo de incrementar o decrementar la velocidad, para el reabastecimiento o para el intercambio de la tripulación a la nave espacial de transporte. "Dockingsz ündockings." el proceso de conexión y desconexión a un módulo de la nave espacial o estación espacial a otra, así como los trayectos que hacen los cosmonautas fuera de la estación para reconstruir o reparar parte de la estación configuran una completa dinámica de la realidad de la estación espacial. Varios sistemas de mediciones acelerométricas desarrollados por NASA's Glenn Research Center han sido instalados en ISS. Los conocidos como *SAMS* (Space Acceleration Measurement System) miden las aceleraciones transitorias y vibratorias causadas por naves, tripulación y perturbaciones del equipamiento. La literatura reciente nos indica que el rango vibratorio de las señales *SAMS* no tiene un impacto relevante en las mediciones de coeficientes de difusión [Ahadi and Saghir, 2013].

Para complementar las señales *SAMS* están instalados los sistemas *MAMS* (Microgravity Acceleration Measurement System) que graban las aceleraciones provocadas por la resistencia aerodinámica del ISS en su movimiento por el espacio, también mide las aceleraciones debido a la rotación del vehículo. Estas aceleraciones son pequeñas y cuasiestacionarias y su rango de frecuencia es menor a 1 Hz.

Registros cuasi-estacionarios dejadas en los sensores *MAMS* localizados en el modulo Destiny [PIM] han sido descargadas del sitio web "PIMS NASA". Las señales, que han sido filtradas, serán empleados en los resultados que mostraremos en esta sección. La velocidad de muestreo ha sido en todos los casos de 0.0625 Hz y la frecuencia de corte de 0.01 Hz. Nos centramos en el rango de bajas frecuencias las cuales resultan más perjudiciales para experimentos de difusión. Estas vibraciones actúan simultáneamente en los tres ejes coordenados.

El sistema de referencia usado para cuantificar el problema es el sistema de coordenadas de Análisis de la Estación Espacial SSA [Kelly, 2004]. Este es un sistema ortonormal con el eje Z_A apuntado hacia el centro de la Tierra (dirección Nadir). El eje X_A coincide con la línea de los módulos tripulados y el eje Y_A coincide con la línea de la Estructura de la Armadura Integrada, la cual forma la columna vertebral de la ISS, como se muestra en la Figura 5.11. El origen de coordenadas está en el centro de masa de la Estación. Para caracterizar las diferentes señales grabadas en los sensores usaremos un concepto llamado *g-dosis* en m/s relacionado a cada eje

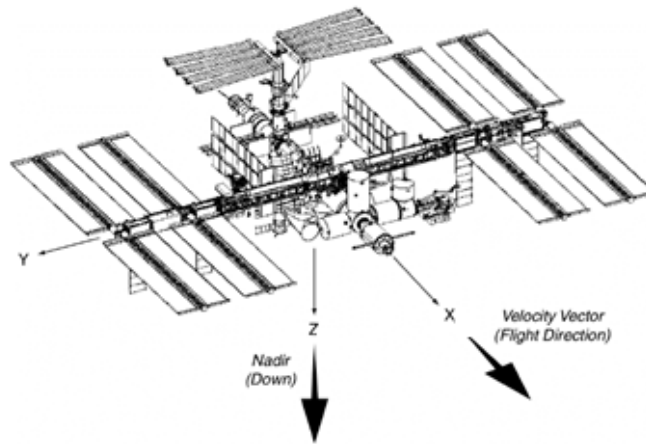


Figura 5.11: Definición de Sistema de referencia SSA [Kelly, 2004]

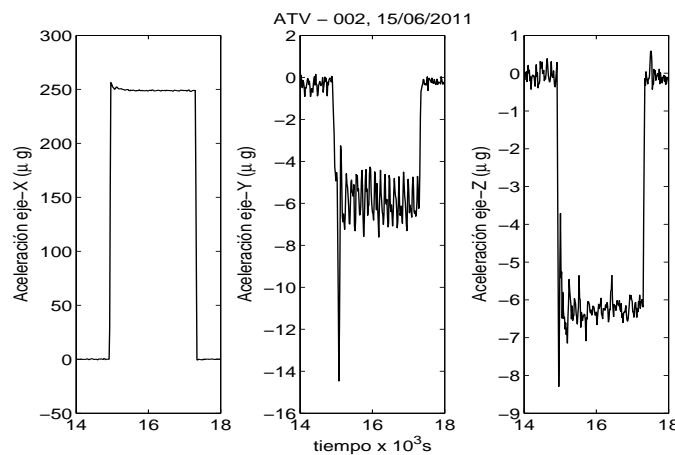


Figura 5.12: Componentes acelerométricos cartesianos en el sistema SSA de una perturbación real (rango de frecuencias cuasiestacionarias).

del sistema de referencia SSA. El g-dosis correspondiente a la coordenada X_A se define como

$$\delta a(X_A)(t) = \int_t^{t+\tau_i} |a_x(t)| \cdot dt$$

y por su definición es equivalente a la variación de la velocidad en un período seleccionado de tiempo, una medida típica del cambio de velocidad usado por controladores de vuelo en el ajuste de vehículos orbitales.

Datos de dosis acelerométricas así como el tiempo de encendido de los propulsores de las naves Progress, ATV, Zarya o Zvezda son dados con más detalles en [Sánchez et al., 2015] en el período 2009-2011, los cuales serán usados en los cálculos presentados en esta sección. Los valores de g-dosis para Y_A y Z_A son muy pequeños por lo tanto su impacto será pequeño comparado a X_A .

Hemos seleccionado cinco escenarios posibles de perturbación (ver [Sánchez et al., 2015] para más detalles), uno para cada nave, con valores grandes de X_A . En la Figura 5.12 se muestra

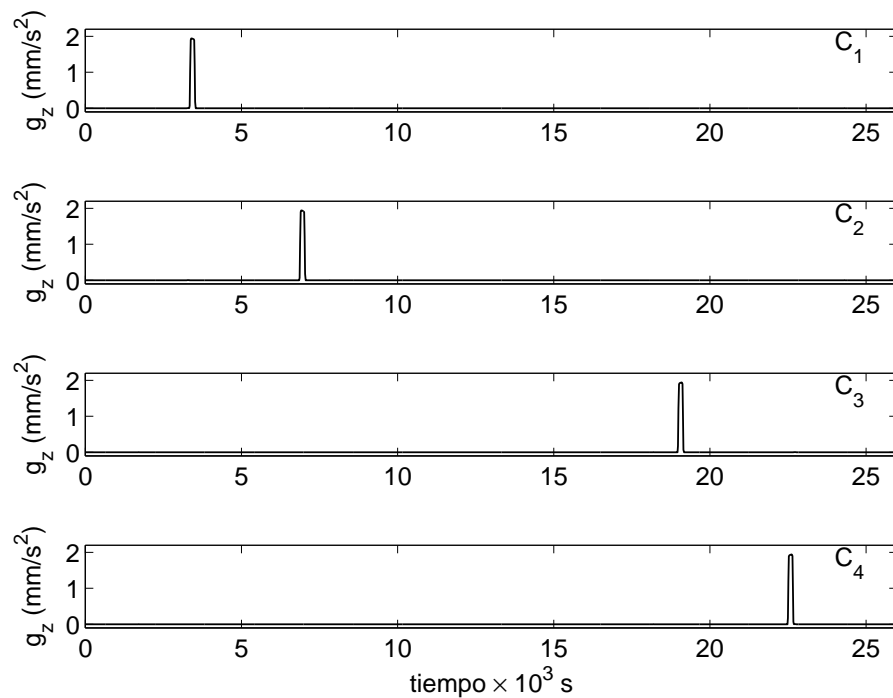


Figura 5.13: Los cuatro casos diferentes considerados C_1 , C_2 , C_3 y C_4 de señal acelerométrica cuya región de mayor perturbación ha sido desplazada convenientemente.

explícitamente una de estas señales quasi-estacionarias. Las tres componentes acelerométricas han sido introducidas en un cálculo 3D reconduciendo la señal del sensor X_A a lo largo del eje x del modelo numérico para la técnica LC, lo cual representa el peor caso posible. Por esa razón el número de Rayleigh ahora es una cantidad vectorial $\mathbf{Ra} = Ra_x \mathbf{i} + Ra_y \mathbf{j} + Ra_z \mathbf{k}$ cuyas tres componentes fueron calculadas a partir de estas señales.

Además se activó la perturbación de cada escenario en un tiempo diferente del proceso difusivo. En la Figura 5.13 se muestran estas cuatro situaciones correspondientes sólo a la aceleración introducida en el eje X . Las otras dos componentes de aceleración fueron activadas en el mismo tiempo para el cálculo como X_A . Los resultados finales son resumidos en Tabla 5.2, pero sólo en el caso de aleaciones de aluminio: los valores de $\%D$ de las cuatro señales están siempre por debajo de los límites de resolución de los experimentos. Un ligero incremento del porcentaje de error parece existir como una función del tiempo en el cual se aplica la perturbación. Esto se debe al hecho de que el flujo tiene cada vez menos tiempo para relajar el impacto de los distintos episodios de impactos. El resto de perturbaciones tienen muy poca amplitud de nivel acelerométrico. Desde este estudio podemos concluir que este tipo de perturbaciones no tienen un significativo impacto en la exactitud en las mediciones de coeficientes de difusión, ya sean en aleaciones de aluminio o mezclas semiconductoras conteniendo silicio.

Tipo de Nave	fecha	$\tau_i(s)$	$\delta a(X_A)(m/s)$	$\delta a(Y_A)(m/s)$	$\delta a(Z_A)(m/s)$	%D(t_{end})			
						C_1	C_2	C_3	C_4
Progress	23/04/2010	1312	0.08	0.08	3.13	$< 1 \times 10^{-3}$	$< 1 \times 10^{-3}$	$< 2 \times 10^{-3}$	$< 2 \times 10^{-3}$
Shuttle Endeavour	18/02/2010	4064	0.058	0.032	1.27	$< 1 \times 10^{-3}$	$< 1 \times 10^{-3}$	$< 1 \times 10^{-3}$	$< 2 \times 10^{-3}$
ATV-002	17/06/2011	1632	0.09	0.09	4.0	$< 2 \times 10^{-3}$	$< 2 \times 10^{-3}$	$< 5 \times 10^{-3}$	$< 7 \times 10^{-3}$
Zvezda	24/01/2011	208	0.053	0.1	2.86	$< 1 \times 10^{-3}$	$< 2 \times 10^{-3}$	$< 3 \times 10^{-3}$	$< 3 \times 10^{-3}$
Zarya	29/09/2011	224	0.049	0.053	2.84	$< 6 \times 10^{-3}$	$< 6 \times 10^{-3}$	$< 8 \times 10^{-3}$	$< 9 \times 10^{-3}$

TABLA 5.2: Datos de fecha, τ_i , g-dosis y resultados de $\%D(t_{end})$ para las diferentes naves espaciales consideradas. C1, C2, C3 and C4 se refiere a las señales mostradas en la Figura 5.13.

5.5. Conclusiones

En este capítulo hemos estudiado el efecto del movimiento convectivo del fluido en las mediciones de coeficientes de difusión de masa en aleaciones metálicas conteniendo aluminio y en mezclas de semiconductores dopadas con silicio. Este estudio ha sido modelado con las ecuaciones de Navier Stokes y transporte de masa en un dominio cilíndrico con las dimensiones del capilar y las condiciones iniciales típicamente usadas en experimentos de difusión. Hemos considerado números de Rayleigh solutal bajos correspondientes a las condiciones de microgravedad en laboratorios en órbita.

Se ha empleado un código numérico 3D para modelar perfiles de concentración simulando la técnica experimental del capilar largo o LC. Estas simulaciones han tenido como fin estimar un coeficiente de difusión "parente" de una mezcla de dos componentes y ha sido comparado con el coeficiente de difusión teórico que se utiliza en las ecuaciones. Se ha determinado el error introducido por el flujo convectivo para diferentes condiciones del vector de fuerza de gravedad. Los resultados indican que

- El nivel de inicio de perturbaciones convectivas relevantes siempre está localizado en ordenes de magnitud correspondientes a la microgravedad como en ISS
- Bajos los efectos de una perturbación armónica de baja frecuencia $\%D(t_{end})$ siempre decrece monótonamente con el incremento de la frecuencia.
- Bajos los efectos de la rotación axial del capilar, el transporte de masa debido a la convección se frena dando lugar a que $\%D(t_{end})$ decrezca rápidamente con el incremento de la velocidad angular.
- Bajo los efectos de aceleraciones vibratorias y transitorias de las condiciones reales de microgravedad en experimentos en naves espaciales o en la ISS en el período estudiado aquí se concluye que no se han detectado que tenga un impacto significativo en todos los cálculos realizados. La magnitud de las perturbaciones microgravitatorias usadas en estos cálculos no conducen a que $\%D(t_{end})$ rebase el límite experimental del 1 %, el cual es el error permitido en las medidas de concentraciones promedios en muestras de materiales sólidos.

Capítulo 6

Conclusiones

En esta tesis hemos simulado numéricamente tres problemas sobre la convección natural en dominios cilíndricos. Como hemos apreciado a través de todos los resultados mostrados gráficamente los flujos primarios y secundarios son totalmente tridimensionales, por lo que en ningún caso una simplificación bidimensional podrían tener la misma validez que los presentados.

Después de exponer en el capítulo Cap. 2 los principales algoritmos numéricos que se utilizaron para obtener los resultados plasmados en esta tesis, en el Cap. ?? estudiamos el flujo inducido en un cilindro horizontal por una diferencia de temperatura en las tapas, lo cual ha sido publicado en Mercader et al. [2014]. El estudio se centró en caracterizar el flujo básico y determinar el umbral de la primera transición del flujo en función de los parámetros característicos del problema, como el parámetro de forma Γ entre 1.5 y 2.5 y el número de Prandtl desde $Pr \approx 0$ hasta $Pr = 0.026$. Este valor de Pr es característico de metales fundidos y compuestos semiconductores a altas temperaturas. El flujo básico es tridimensional y posee todas las simetrías de las ecuaciones y condiciones de contorno aplicadas.

Se observaron cuatro tipo de inestabilidades en la región de parámetros estudiados, que fueron estacionarias u oscilatorias, preservando una o todas las simetrías como vemos en la tabla resumen Tabla 3.4. El autovector correspondiente al autovalor dominante es antisimétrico con respecto a las simetrías rotas. El campo de velocidades y de la temperatura del flujo básico muestra en el plano longitudinal de cilindro un rollo convectivo.

La producción de energía cinética de la perturbación claramente viene del término de cizalladura y no hay diferencias significativas en la contribución de cizalladura de los cuatro modos encontrados.

La contribución modal a la energía cinética media para cada autovector muestra algunas diferencias en su descomposición espectral; la bifurcación estacionaria es dominada por el modo $m = 0$ mientras que los modos oscilatorios tienen contribuciones significativas de los modos azimutales $m = 1$ y $m = 2$. En todos los casos el estado básico muestra el mismo espectro.

Los resultados mostrados para el cilindro y los reportados por otros autores en cajas bidimensionales y tridimensionales son muy diferentes y esto corrobora que la geometría y el número de Prandtl tienen una influencia fundamental en las inestabilidades del flujo básico en problemas de calentamiento lateral.

En el Cap. 4 investigamos sobre la dinámica del fluido contenido en un cilindro horizontal con una diferencia de temperatura entre sus tapas y con rotación axial. El tamaño del cilindro ($\Gamma = 2$) y el número de Prandtl del fluido ($Pr = 0.01$) han sido mantenidos constantes en todos los resultados. Los valores de la velocidad de rotación han sido mantenidos en el rango $\Omega \in [0, 8]$ aunque los principales resultados que mostramos están en la región $\Omega \in [0, 4.6]$. En esta región los valores del número de Rayleigh han sido variados hasta encontrar los puntos de las bifurcaciones primarias.

Sobre rotación en cilindros horizontales se ha encontrado muy poco trabajo en la literatura por lo que gran parte de los resultados obtenidos aquí son novedosos.

Hemos analizado el flujo básico y el umbral de la primera inestabilidad del flujo. Hay una extensa región en el diagrama de bifurcaciones donde el estado básico posee tres soluciones para el mismo valor de Rayleigh y Ω , es decir, existen varias ramas de soluciones; una que comienza en valores de Rayleigh pequeños y otras que nacen en puntos de nodo *saddle*. El complejo diagrama de bifurcaciones obtenido presenta varias bifurcaciones de codimensión 2 muy cercanas.

En el rango de parámetros estudiados existe una competencia entre el efecto térmico, debido a la convección natural y el efecto de la rotación del cilindro. El responsable de la disminución de la energía cinética total es la disminución de la componente axial de la velocidad a medida que aumenta la velocidad angular aplicada al cilindro. La energía cinética total muestra un punto de inflexión lo cual indica que ambos efectos intercambian su prevalencia.

El efecto de la rotación en valores bajos de Ω es destruir la simetría con respecto al plano vertical L_v y forzar al fluido al movimiento en el sentido de la dirección impuesta. El movimiento convectivo provocado por los efectos térmicos se desacelera a medida que aumenta Ω y por consiguiente la transferencia de calor por convección se reduce en favor de un estado conductivo puro según se puede observar en el comportamiento del número de Nusselt tendiendo a la unidad. Para valores altos de Ω todo el fluido rota con un movimiento cercano a un movimiento de cuerpo rígido junto con las paredes del cilindro, produciéndose un incremento de la energía cinética.

El incremento de la velocidad de rotación reduce la diferencia entre los valores extremos de la temperatura en cada sección transversal. Por consiguiente hay una homogeneización de la temperatura en concordancia con la atenuación del flujo longitudinal. Este efecto es el deseado en experimentos de crecimiento de cristales en la frontera de solidificación cuando se aplica rotación axial al contenedor horizontal.

Finalmente en el Cap. 5 hemos analizado los posibles errores en las medidas de los coeficientes de difusión de masa en condiciones de microgravedad en laboratorios en órbita. Aunque las fuerzas gravitatorias sean mucho menores que en las condiciones terrestres las perturbaciones convectivas que provocan son relevantes en las medidas de dichos coeficientes.

De la comparación de los errores de los coeficientes de difusión para el método de capilar largo en la geometría 3D con los obtenidos en 2D [Ruiz et al., 2010, Ruiz and Pallarés, 2012] se observa que los errores relativos $\%D(t_{end})$ en 2D son mayores que los de 3D. Esto nos indica, como era de esperar, que la presencia de paredes introduce fricciones que provocan pérdidas de energía cinética y hacen que el movimiento convectivo producido por la interacción entre el gradiente de densidad y la gravedad sea menos intenso.

Se comprobó también que la rotación axial del capilar frena el transporte de masa debido a la convección dando lugar a que el error en los coeficientes de difusión medidos decrezca rápidamente con el incremento de la velocidad angular.

Las aceleraciones vibratorias y transitorias de las condiciones reales de microgravedad en experimentos en laboratorios espaciales no tienen un impacto significativo en los valores de los coeficientes de difusión medidos siempre que tengan una frecuencia suficientemente alta. La magnitud de las perturbaciones microgravitatorias usadas en estos cálculos no conducen a que el error en dichos coeficientes rebase el límite experimental del 1 %.

Lista de Figuras

1.1. (izquierda) Concentración de Cu en función de la posición en un experimento de difusión en dos diferentes tiempos $t_2 > t_1$. (derecha) Imágenes grabadas de las radiografías tomadas en tres momentos del experimento de difusión donde t_1 corresponde a la imagen de arriba y t_2 la última imagen [Kargl et al., 2011]	3
2.1. Configuración del cilindro horizontal con calentamiento lateral y la disposición de los ejes coordenados. El vector fuerza de gravedad es paralelo al eje x.	8
2.2. Esquema del capilar con la disposición de las dos concentraciones iniciales. $\alpha = 90$ grados si el vector fuerza de gravedad es paralelo al eje x.	12
3.1. Líneas de isoamplitud de la velocidad en el plano longitudinal medio para $Ra = 1500$ y $Pr = 0.015$ para una caja rectangular 3D de altura $y = 1$, ancho $z = 1$ y longitud $x = 4$, calentada en el plano $x = 4$. Figura tomada de Bucchignani and Mansutti [2000]	27
3.2. Configuración del cilindro horizontal con calentamiento lateral y la disposición de los ejes coordenados. El vector fuerza de gravedad es paralelo al eje x.	28
3.3. Flujo transversal $u \hat{r} + v \hat{\theta}$ (arriba) e isolíneas de la velocidad axial w (abajo) en las secciones transversales en $z = 0.05\Gamma$, $z = \Gamma/2$ y $z = 0.95\Gamma$. La dirección positiva del eje z , perpendicular al papel apunta hacia dentro, ($Pr = 0.00715$, $Ra = 1885$, $\Gamma = 2$).	30
3.4. Isolíneas de la desviación de la temperatura en las secciones transversales situadas en $z = 0.05\Gamma$, $z = \Gamma/2$ y $z = 0.95\Gamma$ ($Pr = 0.00715$, $Ra = 1885$, $\Gamma = 2$).	31
3.5. (a) Campo de velocidad (arriba) e isolíneas de la desviación de la temperatura (abajo) en el plano longitudinal L_v con el eje y positivo perpendicular al papel apuntando hacia dentro. (b) Proyección del campo de velocidad e isolíneas de la desviación de la temperatura en el plano horizontal L_h , con el eje x positivo perpendicular al papel apuntando hacia dentro ($Pr = 0.00715$, $Ra = 1885$, $\Gamma = 2$).	32
3.6. a) Número de Rayleigh crítico y b) frecuencia de la bifurcación primaria del flujo básico en función del parámetro de forma Γ para el número de Prandtl $Pr = 0.00715$.	33
3.7. a) Número de Rayleigh crítico y b) frecuencia para la bifurcación primaria del estado básico. R_3 (R_1) es entendido como que en esa región la bifurcación mantiene la simetría de reflexión R_3 (R_1) del estado básico; G si todas las simetrías del flujo básico son mantenidas ($\Gamma = 2$). Los círculos rellenos en a) indican los puntos donde los flujos secundarios han sido calculados y serán mostrados en la Sec. 3.3.6	34

- 3.8. Autovalor responsable de la inestabilidad en el punto crítico $Pr = 0.00715$, $Ra = 1885$. La inestabilidad es oscilatoria, preserva la simetría R_3 del flujo básico y rompe las simetrías R_1 y R_2 . Las partes real e imaginaria de la desviación de la temperatura: (izquierda) en dos secciones transversales en las posiciones $z = \Gamma/4$ y $z = 3\Gamma/4$ desde la tapa caliente (el eje x positivo está dirigido hacia abajo) (derecha) en el plano L_h (el eje x positivo es perpendicular al papel y dirigido hacia adentro). Los colores para las secciones transversales y los planos tienen diferentes escalas. ($\Gamma = 2$). 35
- 3.9. Autovalor responsable de la inestabilidad en el punto crítico $Pr = 0.014$, $Ra = 9967$. La inestabilidad es oscilatoria, preserva todas las simetrías del estado básico. Las partes real e imaginaria de la desviación de la temperatura: (izquierda) en dos secciones transversales en las posiciones $z = \Gamma/4$ y $z = 3\Gamma/4$ desde la tapa caliente, (derecha) en el plano L_v (el eje y positivo es perpendicular al papel y dirigido hacia adentro). Los colores para las secciones transversales y los planos tienen diferentes escalas. ($\Gamma = 2$). 37
- 3.10. Autovalor responsable de la inestabilidad en el punto crítico $Pr = 0.017$, $Ra = 10.05 \times 10^3$. La inestabilidad es estacionaria, preserva la simetría R_1 del flujo básico y rompe las simetrías R_2 y R_3 . Parte real de la desviación de la temperatura: (izquierda) en dos secciones transversales en las posiciones $z = \Gamma/4$ y $z = 3\Gamma/4$ desde la tapa caliente, (derecha) en el plano L_v (el eje y positivo es perpendicular al papel y dirigido hacia adentro). Los colores para las secciones transversales y los planos tienen diferentes escalas. ($\Gamma = 2$). 37
- 3.11. Gráfica de barras mostrando la contribución azimutal E_m del modo crítico a la energía cinética media para el flujo básico y para las partes real e imaginaria de los modos críticos en los puntos de bifurcación. Desde arriba hacia abajo ($Ra = 1885$, $Pr = 0.00715$); ($Ra = 9967$, $Pr = 0.014$); ($Ra = 10.05 \times 10^3$, $Pr = 0.017$) autovector real. 40
- 3.12. Diagrama de bifurcaciones mostrando el valor de E_0 (contribución del modo cero azimutal al valor medio de la energía cinética) de las soluciones estacionarias que son simétricas G en función del número de Rayleigh para diferentes valores del Prandtl (a) $Pr = 0.02492$, (b) $Pr = 0.025$, (c) $Pr = 0.026$. Los círculos vacíos representan bifurcaciones estacionarias que mantienen la simetría R_1 y los círculos rellenos representan bifurcaciones oscilatorias que solo mantiene la simetría R_2 . El signo de la parte real de los autovalores dominantes es incluido; el paréntesis significa que es un autovalor complejo. ($\Gamma = 2$). 41
- 3.13. Campo de velocidad transversal en la sección transversal vertical en $z = \Gamma/2$ y la proyección del campo de velocidad en el plano horizontal L_h para las soluciones básicas estacionarias G -simétricas en los puntos críticos a) $Ra = 12.67 \times 10^3$ y b) $Ra = 13.01 \times 10^3$ (ver texto). $Pr = 0.02492$, $\Gamma = 2$ 42
- 3.14. Autovectores responsables de la inestabilidad en el punto crítico $Pr = 0.026$, $Ra = 13.96 \times 10^3$. La inestabilidad es oscilatoria, preserva la simetría R_2 del flujo básico y rompe R_1 y R_3 . Las partes real e imaginaria de Θ : (izquierda) en dos secciones transversales en las posiciones $z = \Gamma/4$, $3\Gamma/4$ desde la tapa caliente, (derecha) en el plano horizontal L_h (el eje positivo de las x , perpendicular al papel, apunta hacia dentro). Escala de colores para las secciones transversales y las gráficas de planos tienen diferentes escalas. ($\Gamma = 2$). 44
- 3.15. Gráfica de barras de las contribuciones modales E_m a la energía cinética media del flujo básico y para las partes real e imaginarias del modo crítico en el punto de bifurcación. $Ra = 13.96 \times 10^3$, $Pr = 0.026$, $\Gamma = 2$ 44

3.16. Instantáneas en intervalos de tiempo equiespaciados que cubren el período completo en dos secciones transversales $z = \Gamma/4$ y $z = 3\Gamma/4$. Las isolíneas representan la desviación de la temperatura para $Ra = 2500$, $Pr = \sigma = 0.00715$, $\Gamma = 2$	45
3.17. Proyección de la velocidad en el plano horizontal L_h en dos instantes separados por un intervalo de tiempo de medio período. $Ra = 2500$, $Pr = \sigma = 0.00715$, $\Gamma = 2$	46
3.18. Instantáneas de la perturbación de la temperatura (hemos substraído el promedio temporal del campo de temperatura) en intervalos de tiempo equiespaciados en un período completo. Arriba corresponde a la sección transversal en $z = \Gamma/4$ y abajo en $z = 3\Gamma/4$ para $Ra = 10.0 \times 10^3$, $Pr = \sigma = 0.014$, $\Gamma = 2$	47
3.19. Proyección del campo de velocidades (arriba) y la desviación de la temperatura (abajo) en el plano vertical L_v , con el eje y positivo, perpendicular al papel, apuntando hacia dentro (planos de la izquierda), y en el plano horizontal L_h con el eje x positivo, perpendicular al papel, apuntando hacia dentro (planos de la derecha). $Ra = 10.3 \times 10^3$, $Pr = \sigma = 0.017$, $\Gamma = 2$	47
3.20. Proyección del campo de velocidad en el plano horizontal L_h en dos instantes separados por medio período. El eje x positivo es perpendicular al papel apuntando hacia adentro. $Ra = 14.5 \times 10^3$, $Pr = 0.026$, $\Gamma = 2$	47
4.1. Disposición de los ejes coordenados cartesianos y dirección de rotación del cilindro horizontal calentado lateralmente, donde $T_h > T_c$ son las temperaturas en las tapas situadas en $z = 0$ y $z = H$. ($\vec{\Omega} = -\Omega \hat{z}$).	52
4.2. Flujo de velocidad transversal (arriba) e isolíneas de la velocidad axial (abajo) en tres secciones transversales situadas en $z = 0.05\Gamma$, $z = \Gamma/2$ and $z = 0.95\Gamma$. El eje z positivo es perpendicular al papel apuntando hacia dentro. ($Ra = 4500$, $\Omega = 1.1$). ($\vec{\Omega} = -\Omega \hat{z}$).	53
4.3. Isolíneas de la desviación de temperatura Θ en las mismas secciones transversales que la Figura 4.2 ($z = 0.05\Gamma$, $z = \Gamma/2$ and $z = 0.95\Gamma$). El eje z positivo es perpendicular al papel y apuntando hacia dentro. ($Ra = 4500$, $\Omega = 1.1$). ($\vec{\Omega} = -\Omega \hat{z}$).	54
4.4. a) Flujo de velocidad longitudinal y b) líneas de amplitud de la temperatura en el plano en el cual la velocidad axial w es máxima ($Ra = 4500$, $\Omega = 1.1$)	54
4.5. Flujo transversal (arriba) e isolíneas de la velocidad axial w (debajo) en la sección transversal central $z = \Gamma/2$ para las velocidades angulares $\Omega = 0, 1.1, 5.1$ y número de Rayleigh $Ra = 3400$. El eje z positivo es perpendicular al papel y apuntando hacia adentro. ($\vec{\Omega} = -\Omega \hat{z}$).	54
4.6. Flujo transversal (arriba) e isolíneas de la velocidad axial (abajo) w en diferentes secciones transversales para la velocidad angular $\Omega = 1.1$. Número de Rayleigh $Ra = 3400$. El eje z positivo es perpendicular al papel y apunta hacia dentro. ($\vec{\Omega} = -\Omega \hat{z}$).	55
4.7. Flujo transversal (arriba) e isolíneas de la velocidad axial (abajo) w en diferentes secciones transversales para la velocidad angular $\Omega = 5.1$. Número de Rayleigh $Ra = 3400$. El eje z positivo es perpendicular al papel y apunta hacia dentro. ($\vec{\Omega} = -\Omega \hat{z}$).	56
4.8. a) Energía cinética total y b) Número de Nusselt en función de la velocidad de rotación Ω para diferentes valores del número de Rayleigh $Ra = 3400, 4500, 5500$	57

- 4.9. Flujo transversal (arriba) e isolíneas de la velocidad axial w (abajo) en diferentes secciones transversales para la velocidad angular $\Omega = 5.1$. Número de Rayleigh $Ra = 4500$. El eje z positivo es perpendicular al papel y apunta hacia dentro. ($\vec{\Omega} = -\Omega \hat{z}$). 57
- 4.10. Flujo transversal (arriba) e isolíneas de la velocidad axial w (abajo) en diferentes secciones transversales para la velocidad angular $\Omega = 8.1$. Número de Rayleigh $Ra = 4500$. El eje z positivo es perpendicular al papel y apunta hacia dentro. ($\vec{\Omega} = -\Omega \hat{z}$). 58
- 4.11. a) Flujo de velocidad longitudinal y b) líneas de amplitud de la temperatura en el plano en el cual la velocidad axial w es máxima ($Ra = 4500, \Omega = 8.1$). ($\vec{\Omega} = -\Omega \hat{z}$). 58
- 4.12. Diferencia de máxima y mínima temperatura en cada sección transversal a lo largo de la coordenada z para diferentes valores de velocidad angular $\Omega = 1.1, 5.1, 8.1$ para $Ra = 4500$ 58
- 4.13. Energía cinética total en función de la velocidad de rotación Ω para diferentes valores del número de Rayleigh $Ra = 5500, 5600$ 60
- 4.14. (a) E_0 vs. número de Rayleigh para $\Omega = 4.4$, mostrando la existencia de dos curvas desconectadas: la rama azul continúa a valores más pequeños de Rayleigh, mientras que las ramas roja y negra (la primera inestable y la segunda estable hasta algún valor del Rayleigh) continúan para valores superiores del Rayleigh. (b), (c) y (d) representan las isolíneas de la componente z de la vorticidad en la sección transversal $z = 0.5\Gamma$ para cada una de las soluciones marcadas con puntos negros en (a). El eje z positivo es perpendicular al papel y está dirigido hacia dentro. ($\vec{\Omega} = -\Omega \hat{z}$). 61
- 4.15. a) Número de Rayleigh crítico y b) frecuencia angular correspondiente de la inestabilidad primaria del flujo básico (bifurcación de Hopf) en función de la velocidad de rotación (valores pequeños). La línea discontinua roja es una bifurcación de Hopf que rompe la simetría R_2 , la línea continua negra es una bifurcación de Hopf que mantiene la simetría R_2 , la línea azul discontinua con puntos marca la posición de los puntos de nodo *saddle* que limita la zona en la cual existen las tres ramas de soluciones estacionarias con la simetría R_2 . 62
- 4.16. Diagrama de bifurcación extendido en el espacio de parámetros (Ra, Ω). Los flujos básicos cuya estabilidad son analizadas son estacionarios con la simetría R_2 . Para más detalles ver el texto. Los círculos denotan puntos de nodo *saddle*, los cuadrados bifurcaciones de Hopf y los triángulos bifurcaciones de Pitchfork. Los triángulos verdes representan los valores de Ω y Ra cuyas soluciones serán mostradas posteriormente. 63
- 4.18. Imágenes esquemáticas mostrando la curva desconectada para valores fijos de la velocidad de rotación para $\Omega = 3, 45, 3.44, 3.43, 3.42$. Los cuadrados azules denotan una bifurcación de Hopf de baja frecuencia que mantiene la simetría R_2 , los cuadrados rojos marcan una bifurcación de Hopf que rompe la simetría R_2 . Los autovalores correspondientes a cada bifurcación están representados con el mismo color del cuadrado. Dos signos iguales encerrados en paréntesis representan un par de autovalores complejos conjugados, signos sin paréntesis se refieren a autovalores reales. La líneas gruesas representan tramos de la curva cuyas soluciones son estables. 65

4.19.	Detalle del diagrama de bifurcación de la Figura 4.16 en el espacio de parámetros Ra, Ω : Los cuadrados azules marcan la localización de una bifurcación de Hopf de baja frecuencia que mantiene la simetría R_2 , los cuadrados rojos marcan una bifurcación de Hopf que rompe R_2 y los círculos azules los puntos de nodo <i>saddle</i>	65
4.20.	(a) Imágenes esquemáticas mostrando las curvas desconectadas para valores fijos de velocidad de rotación $\Omega = 4.47, \approx 4.475, 4.48, 4.6$. Los cuadrados azules y negros representan bifurcaciones las cuales mantienen la simetría R_2 , un cuadrado rojo representa una bifurcación de Hopf la cual rompe la simetría R_2 y cuyos autovalores han sido escritos en color rojo. Autovalores asociados a la bifurcación que mantiene la simetría R_2 , dibujados con un cuadrado negro, son escritos en negro. Círculos rojos representan puntos de nodo <i>saddle</i> . Dos signos iguales entre paréntesis representan un par de números complejos conjugados. Las líneas gruesas significan que esa parte de la curva es estable. Los diagramas de bifurcación reales para (b) $\Omega = 4.47$ y (c) $\Omega = 4.48$, muestran la contribución del modo cero azimutal a la energía cinética E_0 de las soluciones en función del número de Rayleigh. La posición de las tres bifurcaciones de Hopf y los puntos de nodo <i>saddle</i> son representados usando el mismo símbolo que los usados en las imágenes esquemáticas.	67
4.21.	Instantáneas de los vectores de velocidad transversal (arriba) e isolíneas de la velocidad axial (abajo) para la solución oscilatoria en $Ra=5500$ $\Omega = 0.6$ en la sección transversal $z = 0.5\Gamma$, espaciadas $T/4$ con período $T = 1.1$. El eje positivo z es perpendicular al plano y apunta hacia dentro. ($\vec{\Omega} = -\Omega \hat{z}$).	69
4.22.	Instantáneas de los vectores de velocidad transversal (arriba) e isolíneas de la velocidad axial (abajo) para la solución oscilatoria en $Ra = 7500$ y $\Omega = 2.3$ en la sección transversal $z = 0.5\Gamma$, espaciadas $T/4$ con período $T = 0.89$. El eje positivo z es perpendicular al plano y apunta hacia dentro	70
5.1.	Dispositivo utilizada en el experimento de difusión en la misión FOTON llevada a cabo por la Universidad Técnica de Berlín, donde se emplean las técnicas de capilar largo (L.C.) y <i>shear cells</i> combinados [Roşu-Pflumma et al., 2009].	78
5.3.	Esquema del capilar con la disposición de las dos concentraciones iniciales. $\alpha = 90$ grados si el vector fuerza de gravedad es paralelo al eje x.	80
5.4.	Variación de a) $\%D(t_{end})$ y b) t_{end} en función del número de Rayleigh solutal para SC (triángulos) y LC (círculos). Los cuadrados corresponden a los resultados 2D de $\%D(t_{end})$ en un dominio rectangular [Ruiz et al., 2010]. El vector de gravedad actúa ortogonalmente al gradiente de concentración ($\alpha = 90^\circ$).	83
5.5.	Evolución temporal de la energía cinética media en el capilar en instantes iniciales del proceso de difusión. Tres pares valores del número de Rayleigh con igual componente x ($Ra_x = 1299$) y orientación α han sido seleccionados: (1500,60), (1299,90) y (1500,120). El cuarto valor $Ra = 1500$ y $\alpha = 90$ ha sido añadido a modo de comparación (ver vectores en Figura 5.6).	84
5.6.	Disposición de los componentes x y z del vector de gravedad según los ángulos 60, 90 y 120.	85
5.7.	Variación de $\%D(t_{end})$ en función de la orientación relativa α para diferentes números de Rayleigh. Las líneas sólidas son curvas de interpolación por spline de los datos.	86

5.8. (a) Variación de $\%D(t_{end})$ en función de la frecuencia armónica externa aplicada para dos valores de Rayleigh diferentes: $Ra = 1500$ (triángulos) y $Ra = 3000$ (círculos) y $\alpha = 90^\circ$. (b) Los valores de $\%D(t_{end})$ para las dos diferentes técnicas experimentales: SC con 20 celdas (triángulos) y LC (círculos) y $Ra = 3000$	87
5.9. $\%D(t_{end})$ para diferentes velocidades angulares $\Omega = 0, 1, 100$, número de Rayleigh $Ra = 1500$ y $\alpha = 90^\circ$. Las imágenes insertadas corresponden al campo de velocidad transversal en uno de los planos centrales del cilindro, aunque la longitud de las flechas en cada caso corresponde a diferente amplitud. El flujo ya es dominado por la rotación para pequeños valores de Ω	88
5.10. (a) Diferencia de concentración en t_{end} en diferentes planos $z = const.$ para $\Omega = 0$ (triángulos), $\Omega = 25$ (cuadrados) y $\Omega = 100$ (círculos). Las variaciones de la concentración decrecen significativamente cuando la velocidad de rotación aumenta. (b) Transporte solutal axial medio en los planos $z = const.$ para los mismos valores de Ω	89
5.11. Definición de Sistema de referencia SSA [Kelly, 2004]	91
5.12. Componentes acelerométricos cartesianos en el sistema SSA de una perturbación real (rango de frecuencias cuasiestacionarias).	91
5.13. Los cuatro casos diferentes considerados C_1 , C_2 , C_3 y C_4 de señal acelerométrica cuya región de mayor perturbación ha sido desplazada convenientemente.	92

Lista de Tablas

3.1.	Propiedades físicas del compuesto <i>GaAs</i> [Dost and Lent, 2007]	26
3.2.	Simetrías mantenidas y rotas y comportamiento temporal de la inestabilidad que tiene lugar según el rango de número de Prandtl.	33
3.3.	Simetría preservada, número de Rayleigh Ra , número de Prandtl Pr , producción normalizada de energía cinética por el término de cizalladura asociada al autovector en los puntos de bifurcación y el término principal desestabilizador de la expansión de cizalladura en cada caso. ($\Gamma = 2$).	39
3.4.	Simetrías mantenidas y rotas y comportamiento temporal de la inestabilidad según el rango de número de Prandtl.	44
5.1.	Parámetros geométricos del capilar y propiedades termofísicas típicas de fluidos binarios usados en nuestros experimentos numéricos. El parámetro $\tau(s)$ es el tiempo característico calculado a partir de $\frac{(2R)^2}{D}$	81
5.2.	Datos de fecha, τ_i , g-dosis y resultados de $\%D(t_{end})$ para las diferentes naves espaciales consideradas. C1, C2, C3 and C4 se refiere a las señales mostradas en la Figura 5.13.	93

Anexo A

Anexo

A.1. Coordenadas Cilíndricas

Dada la geometría del problema es conveniente transformar nuestro sistema de coordenadas de cartesianas a cilíndricas para el campo de velocidades $\mathbf{u} = \mathbf{u}(r, \theta, z, t)$ y la temperatura $T = T(r, \theta, z, t)$ o la concentración $C = C(r, \theta, z, t)$. Definimos las coordenadas cilíndricas (r, θ, z) como

$$r = \sqrt{x^2 + y^2}, \quad \theta = \arctan \frac{y}{x} \quad z = z, \quad r \geq 0, \quad 0 \leq \theta \leq 2\pi$$

La matriz de las relaciones entre las componentes de un vector en coordenadas cartesianas y cilíndricas es

$$\begin{bmatrix} A_x \\ A_y \\ A_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_r \\ A_\theta \\ A_z \end{bmatrix}$$

En las ecuaciones (3.1) y (2.6) los operadores del laplaciano y el término de advección se expresan en coordenada cilíndricas como

$$\nabla^2 \mathbf{u} = \begin{cases} \partial_r^2 u + r^{-2} \partial_\theta^2 u + \partial_z^2 u + r^{-1} \partial_r u - \frac{2}{r^2} \partial_\theta v - \frac{u}{r^2}, \\ \partial_r^2 v + r^{-2} \partial_\theta^2 v + \partial_z^2 v + r^{-1} \partial_r v + \frac{2}{r^2} \partial_\theta u - \frac{v}{r^2}, \\ \partial_r^2 w + r^{-2} \partial_\theta^2 w + \partial_z^2 w + r^{-1} \partial_r w \end{cases}$$

$$(\mathbf{u} \cdot \nabla)u = u \partial_r u + \frac{v}{r} \partial_\theta u + w \partial_z u - \frac{v^2}{r},$$

$$(\mathbf{u} \cdot \nabla)v = u \partial_r v + \frac{v}{r} \partial_\theta v + w \partial_z v + \frac{vu}{r},$$

$$(\mathbf{u} \cdot \nabla)w = u \partial_r w + \frac{v}{r} \partial_\theta w + w \partial_z w,$$

$$(\mathbf{u} \cdot \nabla)* = u \partial_r * + \frac{v}{r} \partial_\theta * + w \partial_z *$$

aquí $*$ = T o C

A.2. Método de Residuo Mínimo Generalizado: GMRES

Para un problema matricial del tipo $\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b}$, a partir del vector inicial \mathbf{x}_0 resolvemos el sistema lineal $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0$ formado por una matriz \mathbf{A} de orden N_t (dimensión de la malla) y el vector \mathbf{b} . Calculamos una secuencia de vectores

$$\{\mathbf{r}_0, \mathbf{A} \mathbf{r}_0, \mathbf{A}^2 \mathbf{r}_0, \dots, \mathbf{A}^{j-1} \mathbf{r}_0\}$$

y mediante el proceso de Arnoldi calculamos un sistema de vectores ortonormales \mathbf{v}_i ($i = 1, 2, \dots, J$) obtenidos a partir de los residuos \mathbf{r}_i ($i = 0, 2, \dots, J-1$) comenzando por $\mathbf{v}_1 = \frac{\mathbf{r}_0}{\|\mathbf{r}_0\|}$. Se definen las bases ortonormales $\mathbf{V}_J \equiv [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_J]$ y la matriz superior de Hessenberg \mathbf{H} de orden $(J+1) \cdot J$ cuyos elementos son $(\mathbf{A}\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j)$, $1 \leq i \leq J$ y $1 \leq j \leq i+1$.

La tarea es encontrar el vector \mathbf{y}_J que minimiza $\|\beta \mathbf{e}_1 - \mathbf{H}_J \mathbf{y}\|$, donde $\beta = \|\mathbf{r}_0\|$, \mathbf{e}_1 es el vector unitario. Posteriormente se calcula $\mathbf{x}_n = \mathbf{x}_0 + \mathbf{V}_J \mathbf{y}_J$ hasta que el residuo $\mathbf{r}_n \leq \epsilon$ de $\mathbf{r}_n = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_n$ sea menor que un valor de tolerancia seleccionada.

Este método es ventajoso porque la matrix \mathbf{A} no necesita ser simétrica y puede ser real o compleja, además permite la evaluación de la acción $\mathbf{A} \mathbf{x}_n$ sin necesidad de almacenar \mathbf{A} . La parte no favorable del método radica en que la construcción de las matrices es computacionalmente costosa cuando el número de iteraciones es elevado (para más detalles [Saad and Schultz, 1986, Frayssé et al., 2005]).

A.3. Método de Arnoldi

El método de Arnoldi [Saad, 1992] es una poderosa herramienta para encontrar simultáneamente varios autovalores λ_i y autovectores x_i de una matrix \mathbf{D} de orden N_t , donde $N_t = (N+1) \cdot M \cdot (K+1)$ es la dimensión de la malla, a diferencia del método de potencia que solo converge a un simple autovalor. El método de Arnoldi utiliza un subespacio de Krylov \mathbf{K}_j que es definido de la ortogonalización de una secuencia de vectores

$$\{\delta \mathbf{U}^0, \mathbf{D} \delta \mathbf{U}^0, \mathbf{D}^2 \delta \mathbf{U}^0, \dots, \mathbf{D}^{j-1} \delta \mathbf{U}^0\}$$

generados a partir de la matrix \mathbf{D} y un vector inicial $\mathbf{w}_1 = \delta \mathbf{U}^0$ mediante el siguiente cálculo para $j = 1, 2, \dots, J \leq N_t$

$$\mathbf{v}_j = \frac{\mathbf{w}_j}{\|\mathbf{w}_j\|}$$

$$\mathbf{w}_{j+1} = \mathbf{D}\mathbf{v}_j - \sum_{l=1}^j \mathbf{v}_l (\mathbf{v}_l, \mathbf{D}\mathbf{v}_j)$$

donde J representa el número máximo de acciones en el operador \mathbf{D} , es decir, las J -llamadas a la subrutina que calcula $\delta \mathbf{U}^{j+1} = \mathbf{D} \delta \mathbf{U}^j$ necesarias para llevar a cabo los pasos del proceso de Arnoldi [Edwards et al., 1994].

El método consiste en construir autovectores aproximados en este subespacio de Krylov $\mathbf{K}_J = [\mathbf{v}_0, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3, \dots, \mathbf{v}_{J-1}]$. Construimos la matriz $V_{N_t \times J}$ donde cada columna es \mathbf{v}_j , esto es

$$\mathbf{V} \mathbf{e}_j = \mathbf{v}_j$$

donde \mathbf{e}_j es el j -ésimo vector unitario. La proyección ortogonal de \mathbf{D} en el subespacio de Krylov es representado por la matriz superior de Hessenberg \mathbf{H} de orden J y satisface la relación

$$\mathbf{D} V_J - V_J H_J = 0$$

En caso general despues de J iteraciones la relación siguiente se cumple

$$\mathbf{D} V_J - V_J H_J = \mathbf{f} \mathbf{e}_J$$

donde el vector \mathbf{f} es usualmente llamado el residual de la factorización de Arnoldi. Sea (λ_i, y_i) los autopares (autovalores, autovectores) de la matriz \mathbf{H} . Entonces el valor de Ritz λ_i y el vector de Ritz $x_i = V_J y_i$ dan valores aproximados de los autopares de \mathbf{D} . Para valorar la exactitud de este resultado calculamos la norma residual

$$\|\mathbf{D} x_i - \lambda_i x_i\| = \|\mathbf{D} V_J y_i - \lambda_i V_J y_i\| = \|(\mathbf{D} V_J - V_J H_J) y_i\| = \|\mathbf{f} \mathbf{e}_J y_i\|$$

Referencias

- Iss acceleration data archives. URL <http://pims.grc.nasa.gov/html/ISSAccelerationArchive.html>.
- A. Ahadi and M.Z. Saghir. Transient effect of micro vibration from two space vehicles on mixture during thermodiffusion experiment. *Microgravity Sci. Technol.*, 25:127–139, 2013.
- E.L. Allgower and K. Georg. *Introduction to numerical continuation method*. SIAM Publications Online, 2003.
- W.E. Arnoldi. The principle of minimized iterations in the solution of the matrix eigenvalue problem. *Quart. Appl. Math.*, 9:17–29, 1951.
- A. Bergeon and E. Knobloch. Natural doubly diffusive convection in three-dimensional enclosures. *Phys. Fluids*, 14:3233–3250, 2002.
- A. Bergeon, D. Henry, H. Benhadid, and L. S. Tuckerman. Marangoni convection in binary mixtures with soret effect. *Journal of Fluid Mechanics*, 375:143–177, 1998.
- T. Bergman, A. Lavine, F. P. Inropera, and D.P. Dewitt. *Fundamentals of heat and mass transfers*. John Wiley and Sons, 2002.
- J. Boyd. *Chebyshev and Fourier Spectral Methods*. Dover, 2001.
- D.L. Brown, R. Cortez, and M. Minion. Accurate projection methods for the incompressible navier - stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 168, 2001.
- E. Bucchignani and D. Mansutti. Horizontal thermal convection in a shallow cavity: oscillatory regimes and transition to chaos. *International Journal of Numerical Methods for Heat and Fluid*, 10:179–195, 2000.
- E. Chenier, H. DangVu, and S. Delcarte. Computation of hopf bifurcations for the navier stokes equations using arnoldi’s method. *Proceedings of the 7th. International Symposium on Computational Fluid Dynamics*, pages 306–311, 1997.
- E. Chenier, C. Delcarte, and G. Labrosse. Stability of the axisymmetric buoyant-capillary flows in a laterally heated liquid bridge. *Physics of Fluids*, 11:527–541, 1999.

- S. Dost and B. Lent. *Single crystal growth of semiconductors from metallic solutions*. Elsevier, 2007.
- W.S. Edwards, R.A. Tuckerman, L.S. Friesner, and D.C. Sorensen. Krylov methods for the incompressible navier-stokes equations. *J. Comput. Phys.*, 110:82–102, 1994.
- B. Fornberg. A pseudospectral approach for polar and spherical geometries. *SIAM J. Sci. Comp.*, 16:1071–1081, 1995.
- V. Frayssé, L. Giraud, S. Gratton, and J. Langou. A set of gmres routines for real and complex arithmetics on high performance computers. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 31:228–238, 2005.
- S. Fujiwara, Y. Watanabe, Y. Namikawa, T. Keishi, K. Matsumoto, and T. Kotani. Numerical simulation on dumping of convection by rotating a horizontal cylinder during crystal growth from vapor. *Journal of Crystal Growth*, 192:328–334, 1998.
- B. Gao, X.J. Chen, S. Nakano, and K. Kakimoto. Crystal growth of high-purity multicrystalline silicon using a unidirectional solidification furnace for solar cells. *J. of Crystal Growth*, 312:1572–1576, 2010.
- J. P. Garandet and T. T. Alboussière. *Progress in crystal growth and characterization of materials. Chapter: Bridgman growth: modelling and experiments*. Pergamon, 1999.
- J.P. Garandet. New determinations of diffusion coefficients for various dopants in liquid silicon. *Int. J. of Thermophysics*, 28:1285–1303, 2007.
- J.P. Garandet, G. Mathiak, V. Botton, P. Lehmann, and A. Griesche. Reference microgravity measurements of liquid phase solute diffusivities in tin- and aluminum-based alloys. *International Journal of Thermophysics*, 25:249–272, 2004.
- A.Yu. Gelfgat, P.Z. Bar-Yoseph, and A.L. Yarin. Stability of multiple steady states of convection in laterally heated cavities. *J. Fluid Mech.*, 388:315–334, 1999a.
- A.Yu. Gelfgat, P.Z. Bar-Yoseph, and A.L. Yarin. Non-symmetric convective flows in laterally heated. *Int. J. Comput. Fluids and Dynam.*, 11:261–273, 1999b.
- A. Griesche, B. Zhang, E. Solórzano, and F. García-Moreno. Note: X-ray radiography for measuring chemical diffusion in metallic melts. *Review of Scientific Instruments*, 81:056104, 2010.
- J.E. Hart. Stability of thin non-rotating hadley circulations. *J. Atmos. Sci.*, 29:687–697, 1972.
- D. Henry and H. Ben Hadid. Multiple modes of instability in a box heated from the side in low-prandtl-number fluids. *Physics of Fluids*, 19:081702, 2007a.

- D. Henry and H. Ben Hadid. Multiple flow transitions in a box heated from the side in low-prandtl-number fluids. *Phys.Rev.*, 76:016314, 2007b.
- B. Hof, A. Juel, L. Zhao, D. Henry, H. Ben Hadid, and T. Mullin. On the onset of oscillatory convection in molten gallium. *J. Fluid Mech.*, 515:391–413, 2004.
- S. Hughes and A. Randriamampianina. An improved projection scheme applied to pseudospectral methods for the incompressible navier-stokes equations. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 28:501–521, 1998.
- T. Itami, T. Masaki, H. Aoki, S. Munejiri, M. Uchida, S. Matsumoto, K. Kamiyama, and K. Hoshino. Self diffusion under microgravity and structure of group 4b liquids. *Journal of Non Crystalline Solids*, 312:177–182, 2002.
- A. Juel, T. Mullin, H. Ben Hadid, and D. Henry. Three-dimensional free convection in molten gallium. *J. Fluid Mech.*, 436:267–281, 2001.
- F. Kargl, M. Balter, Ch. Stenzel, Th. Gruhl, N. Daneke, and A. Meyer. Versatile compact x-ray radiography module for materials science under microgravity conditions. *Journal of Physics: Conference Series*, 327:1–8, 2011.
- G.E. Karniadakis, M. Israeli, and S.A. Orszag. High-order splitting methods for the incompressible navier-stokes equations. *Journal of computational physics*, 97:414–443, 1991.
- E. Kelly. Microgravity acceleration environment of the international space station. quasi-steady regime, nasa 7th annual microgravity environment interpretation tutorial, nasa glenn research center, 2004.
- M. Lappa. Secondary and oscillatory gravitational instabilities in canonical three-dimensional models of crystal growth from the melt. part 2: lateral heating and the hadley circulation. *C. R. Mecanique*, 335:261–268, 2007.
- P. Laure and B. Roux. Linear and non-linear analysis of the hadley circulation. *J. Cryst. Growth*, 97:226–234, 1989.
- R.B. Lehoucq, D.C. Sorensen, and P. Vu. Arpack: An implementation of the implicitly restarted arnoldi iteration that computes some of the eigenvalues and eigenvectors of a large sparse matrix, 1995. URL netlib@ornl.govunderdirectoryscalapack.
- R.J. LeVeque. *Finite difference methods for ordinary and partial differential equations Steady state and time - dependent problems*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2007.
- L. Liu, S. Nakano, and K. Kakimoto. Dynamic simulation of temperature and iron distributions in a casting process for crystalline silicon solar cells with a global model. *J. Crystal Growth*, 292:515–518, 2006.

- X.H. Luo, Q. Huang, B.D. Liu, X.M. Zhang, and Y.Y. Li. Al₃Ni eutectic alloy and Al₃Ni composite directionally solidified under microgravity and normal gravity. *Adv. Space Res.*, 32:225–230, 2003.
- D.V. Lyubimov, A.V. Burnysheva, H. Ben Hadid, T.P. Lyubimova, and D. Henry. Rotating magnetic field effect on convection and its stability in a horizontal cylinder subjected to a longitudinal temperature gradient. *J. Fluid Mech.*, 664:108–137, 2010.
- T.P. Lyubimova, D.V. Lyubimov, V.A. Morozov, R.V. Scuridin, H. Ben Hadid, and D. Henry. Stability of convection in a horizontal channel subjected to a longitudinal temperature gradient. part 1. effect of aspect ratio and prandtl number. *J. Fluid Mech.*, 635:275–295, 2009.
- D. Ma, D. Henry, and H. BenHadid. Three-dimensional numerical study of natural convection in vertical cylinders partially heated from the side. *Phys. Fluids*, 17:124101, 2005.
- Ch. K. Mamun and L. S. Tuckerman. Asymmetry and hopf bifurcation in spherical couette flow. *Physic of Fluids*, 7:80–91, 1995.
- G Mathiak, A. Griesche, K. H. Kraatz, and G. Froberg. Diffusion in liquid metals. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 205:412–416, 1996.
- E. Meca, I. Mercader, O. Batiste, and L Ramírez-Piscina. Blue sky catastrophe in double-diffusive convection. *Physical Review Letters*, 92:234501, 2004.
- E. Meca, I. Mercader, and L. Ramírez-Piscina. Transitions between symmetric and nonsymmetric regimes in binary-mixture convection. *Physica D*, 303:39–49, 2015.
- I. Mercader, O. Batiste, L. Ramirez-Piscina, X. Ruiz, S. Ruediger, and J. Casademunt. Bifurcations and chaos in single-roll natural convection with low prandtl number. *Physics of Fluids*, 17:104108, 2005.
- I. Mercader, O. Batiste, and A. Alonso. An efficient spectral code for incompressible flows in cylindrical geometries. *Computers and Fluids*, 39:215–224, 2010.
- M.I Mercader, Sanchez O., and O. Batiste. Secondary flows in a laterally heated horizontal cylinder. *Physics of fluids*, 26:1–21, 2014.
- A. Meyer and F. Kargl. Diffusion of mass in liquid metals and alloys-recent experimental developments and new perspectives. *Int. J. Microgravity Sci. Appl.*, 30:30–35, 2013.
- H. Müller and G. Müller-Vogt. Investigation of additional convective transports in liquid metals and semiconductors during diffusion measurements by means of shear cell technique. *Cryst. Res. Technol.*, 38:707, 2003.

- G. Müller-Vogt and R. Koeçler. Application of the shear cell technique to diffusivity measurements in melts of semiconducting compounds: Ga—sb. *Journal of Crystal Growth*, 186:511–519, 1998.
- J. Pallarés, I. Cuesta, and F.X. Grau. Laminar and turbulent rayleigh–bénard convection in a perfectly conducting cubical cavity. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 23:346–358, 2002.
- R. Roşu-Pflumma, W. Wendlb, G. Müller-Vogtb, S. Suzukic, K. H. Kraatzd, and G. Frohbergd. Diffusion measurements using the shear cell technique: Investigation of the role of marangoni convection by pre-flight experiments on the ground and during the foton m2 mission. *Int. J. Heat and Mass Transfer*, 52:6042–6049, 2009.
- X. Ruiz and J. Pallarés. On the accuracy of the diffusion coefficient measurements using different initial shear cell configurations at low and moderate rayleigh numbers. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 55:6966–6978, 2012.
- X. Ruiz, J. Pallarés, and F.X. Grau. On the accuracy of the interdiffusion measurements at low and moderate rayleigh numbers. some computational considerations. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 53:3708–3720, 2010.
- Y. Saad. *Numerical methods for large eigenvalue problems*. SIAM, 1992.
- Y. Saad and M.H. Schultz. Gmres:a generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems. *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, 7:856–869, 1986.
- A.K. Sahai. Thermosolutal convection in the presence of both vertical and horizontal temperature gradients. *J. Appl. Mech*, 66:181–196, 1999.
- R. Savino and D. Paterna. Compatibility of the microgravity environment of the international space station with fluid and material science experimentation. *Acta Astronautica*, 51:229–241, 2002.
- R. Seydel. *Practical Bifurcation and Stability Analysis*. Springer, 2010.
- R.W. Smith, B.J. Yang, and W.D. Huang. The measurement of solute diffusion coefficients in dilute liquid alloys: the influence of unit gravity and g-jitter on buoyancy convection. *Ann. N. Y. Acad. Sci.*, 1027:110–128, 2004.
- O. Sánchez, X. Ruiz, M. Pujalte, I. Mercader, O. Batiste, and J. Gavaldà. On the determination of diffusion coefficients in two-component alloys and doped semiconductors. several implications concerning the international space station. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 86:508–518, 2015.

- S. Takaia, M. Kamatab, S. Fujinec, K. Yonedac, K. Kandac, and T. Esakaa. Diffusion coefficient measurement of lithium ion in sintered $\text{Li}_{1.33}\text{Ti}_{1.67}\text{O}_4$ by means of neutron radiography. *Solid State Ionics*, 123:165–172, 1999.
- L. Trefethen. *Spectral Methods in Matlab*. 2001.
- L.N. Trefethen and D. Bau. *III. Numerical Linear Algebra*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 1997.
- B.V. Tryggvason, R. F. Redden, and R. A. Herring. The vibration environment on the international space station: its significance to fluid-based experiments. *Acta Astronautica*, 48:59–70, 2001.
- L. S. Tuckerman and D. Barkley. Bifurcation analysis for timesteppers. 119:453–466, 2000.
- S. Vaux, H. Ben Hadid, and D. Henry. Study of the hydrodynamic instabilities in a differentially heated horizontal circular cylinder corresponding to a bridgman growth configuration. *J. Cryst. Growth*, 290:674–682, 2006.
- S. Xin and P. LeQuéré. Linear stability analyses of natural convection flows in a differentially heated square cavity with conducting horizontal walls. *Physics of Fluids*, 13: 2529–2542, 2001.
- S. Xin and P. LeQuéré. An extended chebushev pseudo-spectral benchmark for the 8:1 differentially heated cavity. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 40: 981–998, 2002.
- Y. Yan, V. Shevtsova, and M.Z. Saghir. Numerical study of low frequency g-jitter effect on thermal diffusion. *Fluid Dynamics and Material Processing*, 1:315–328, 2005.
- B.J. Yang, W. D. Huang, and R.W. Smith. A numerical study on the intrinsic error involved in the use of a shear cell to measure liquid diffusion coefficients. *J. Applied Phys.*, 95: 7881–7887, 2004.
- B. Zhang, A. Griesche, and Meyer A. Diffusion in al-cu melts studied by time-resolved x-ray radiography. *Physical Review Letter*, 104:035902, 2010.
- Bo. Zhang, A. Griesche, and A. Meyer. Relation between self diffusion and interdiffusion in al-cu melts. *diffusion-fundamentals.org*, 11:1–8, 2009.
- M. Zhao, L. Robillard, and P. Vasseur. Mixed convection in a low rotation horizontal cylinder. *Int. Comm. Heat Mass Transfer*, 25:1031–1040, 1998.